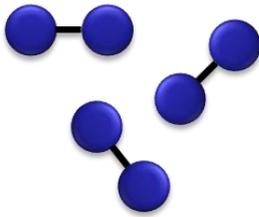


Einleitung

Festkörperphysik ist die Studie der strukturellen, optischen, elektrischen und opto-elektronischen Eigenschaften der festen Materie

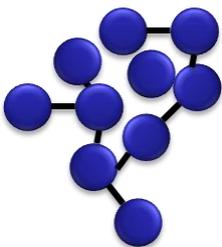
Die verschiedenen Formen der Materie können anhand der Ordnung der Atome beschrieben werden (bzw. Atome, Moleküle, künstliche Atome)

Gase



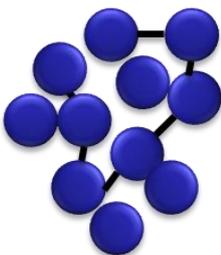
- *Atome statistisch verteilt*
- *Isotropisch*
- *Keine feste Form/Volume*
- *Komprimierbar*

Flüssigkeiten



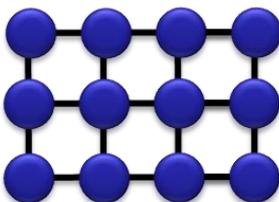
- *Atome statistisch verteilt*
- *Isotropisch*
- *Feste Form/Volume*
- *Leicht Komprimierbar*

Glasses



- *Atome statistisch verteilt*
- *Isotropisch/anisotropisch*
- *Feste Form/Volume*
- *Weniger Komprimierbar*
- *Viskose oder "kalte" Flüssigkeit*

Kristalle



- *Atome in Gitter angeordnet*
- *Isotropisch/anisotropisch*
- *Feste Form/Volume*
- *Wenig komprimierbar*

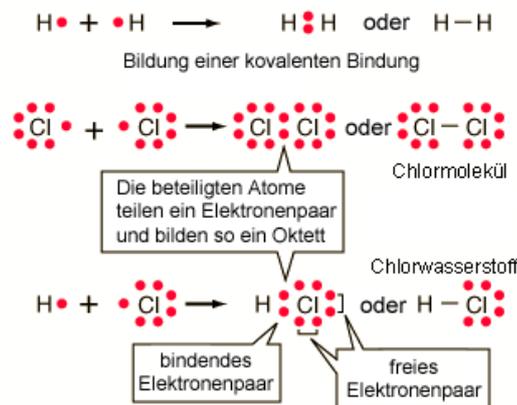
Bindungen in Festkörper

Wir werden als erstes die Wechselwirkungen der Atome bzw. der Ionen in eines Kristalls anschauen.

Im Wesentlichen gibt es 5 Bindungsarten

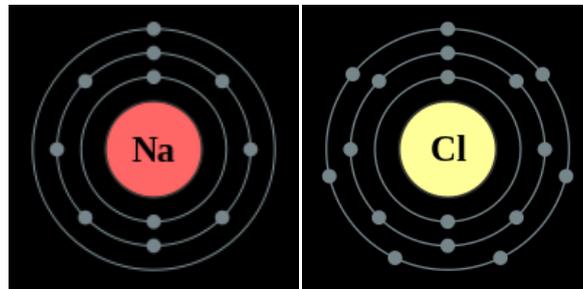
Kovalente Bindungen

Bindungen zwischen neutralen Atomen, die durch überlappende Teile der Elektronenverteilung zusammenhalten. Die Elektronen sind noch an den jeweiligen Atome gebunden, und Nachbaratome teilen die Ladung. Beispiel gas - H₂, Cl₂; Isolatoren- Diamant (C); Halbleiter - Silizium



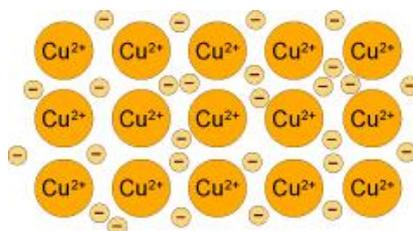
Ionische Bindungen

Bindungen in Metallhalogeniden (Salz). Zwischen eines Metalls und Halogen. Beispiel NaCl.



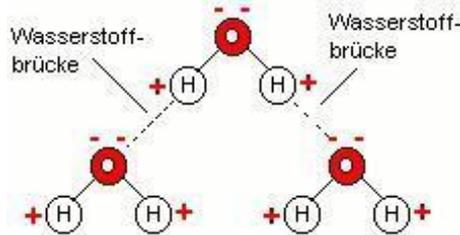
metallische Bindungen

Bindungen zwischen metallischen Elementen. Dabei gibt jedes Atom ein Elektron an einem Elektronensee ab, der sich über den gesamten Kristall erstreckt, und die Elektronen bewegen sich frei im Kristall zwischen positiv geladene Ionenrümpfe. Beispiel Cu.



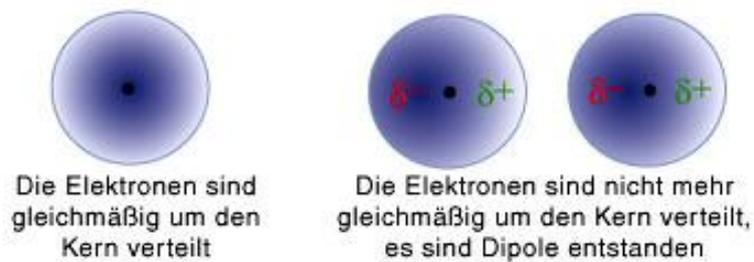
Wasserstoffbrückenbindungen

bilden sich aus, wenn Wasserstoff an ein Atom mit hoher Elektronegativität (N, O, F) gebunden wird. Dabei wird dem Wasserstoffatom das eine Elektron weitgehend entzogen. Befindet sich dieses Wasserstoffatom in der Nachbarschaft eines anderen Atoms, kann es zu einer Bindung zwischen dem lokal positiven Wasserstoff und der Elektronenhülle des anderen Atoms kommen. Beispiel – Wasser. Das Molekül ist durch die starke Elektronegativität des Sauerstoffs ein Dipol.



Van-der-Waals

Bindungen zwischen Edelgasen bzw. Molekülen mit geschlossenen Elektronenschalen. Beispiel Argon. Die Bindungen entstehen über zeitlich fluktuierende Dipolmomente der Atome, die zu einer Anziehung führen.

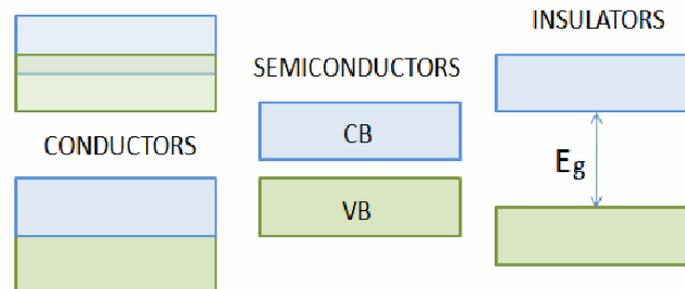


Bindungen und Bindungsenergien

Ionisch	Kovalent	Metallisch	H-Brücke	Van der Waals
8,2 – 39.9 eV	1 eV (Einfach) 5 eV (Doppel) 10 eV (Dreifach)	1 eV	0,1 – 1 eV	0,05 – 0,005 eV

Elektronen in Metalle – das freie Elektronengas

Leitungselektronen in Metallen können als „Elektronengas“ in einem Gitter von positiv geladenen Ionenrümpfen beschrieben. Wir werden sehen, dass viele metallische Eigenschaften von Metallen durch dieses einfache Bild beschrieben werden kann. Wenn wir die Energien der Elektronen, und den Einfluss der Ionenrümpfe an der Bewegung der Elektronen berücksichtigen, können wir auch die energetische Struktur und elektrisches Verhalten von Isolatoren und Halbleiter auch beschreiben.



Eigenschaften von Metallen

Metallische Eigenschaften waren experimentell sehr früh dokumentiert. Theoretische Beschreibung war lange ein Rätsel und wurde viel später entwickelt.

Diese Eigenschaften sind:

1. In thermischen Gleichgewicht, die elektrische Leitfähigkeit ist durch das Ohmsche Gesetz beschrieben

$$J = \sigma E$$

J – Stromdichte (A/m^2); E – elektrisches Feld (V/M); σ – Leitfähigkeit ($\Omega^{-1}m^{-1}$), ein Materialparameter.

2. Metalle ($10^6 - 10^8 \Omega^{-1}m^{-1}$) haben, im Vergleich zu Halbleiter ($10^{-4} - 10^5 \Omega^{-1}m^{-1}$) und Isolatoren ($10^{-4} - 10^{-16} \Omega^{-1}m^{-1}$), eine hohe Leitfähigkeit.
3. Elektronische Leitfähigkeit trägt einen großen Beitrag zu Wärmeleitfähigkeit in Metallen
4. Leitfähigkeit in Metallen steigt mit sinkender Temperatur
5. Bei sehr niedriger T , die Leitfähigkeit sätigt wegen Elektronstreuung an Gitterdefekten. Das ist durch das Matthiessengesetz beschrieben:

$$\frac{1}{\sigma(T)} = \frac{1}{\sigma_{pure}(T)} + \frac{1}{\sigma_{imp}(T)}$$

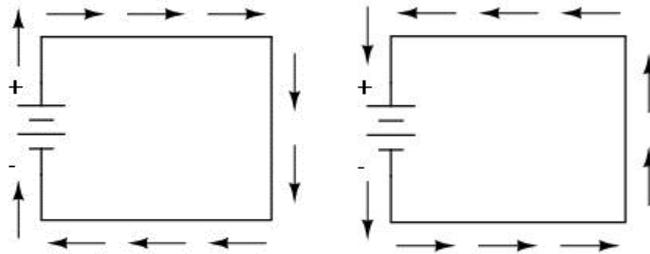
6. Magnetische Effekte wurden in manchen Metalle (Ferroelektrik) beobachtet
7. Ungefähr die Hälfte aller Metallen sind bei niedriger T Supraleiter

Technischer Strom und Elektronenstrom

Die Konvention für die Stromrichtung wurde festgelegt, bevor die Entdeckung des Elektrons.

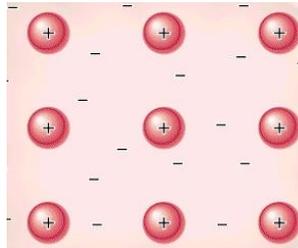
Technischer Strom fließt von positiv (hi) zu negativ (lo) – Teilchen sind positiv geladen und fließen von hoher Energie zu niedriger Energie.

Elektronenstrom fließt von negativ (lo) zu positiv (hi) – Elektronen sind negativ geladen und fließen von hoher Energie zu niedriger.



Das Elektronengas und Austrittsarbeit

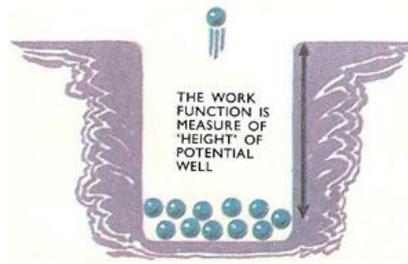
Im einfachen Bild können wir ein Metall mit den folgenden Annahmen beschreiben



- Periodisches Gitter positiver Ionenrümpfe und ein Elektronengas
- Das Elektronengas ist homogen verteilt
- Die Elektronendichte hängt von der Zahl der Valenzatomen ab (zB $2 \times 10^{28} / \text{m}^3$ für 1 Valenzelektron/Atom)
- Wegen der hohen Dichte der Elektronen ist der Einfluss des positiv geladenen Ionenrumpf vernachlässbar
- Die Ladungsdichte variiert im Metall, aber die Gesamtladung des Festkörpers ist null.

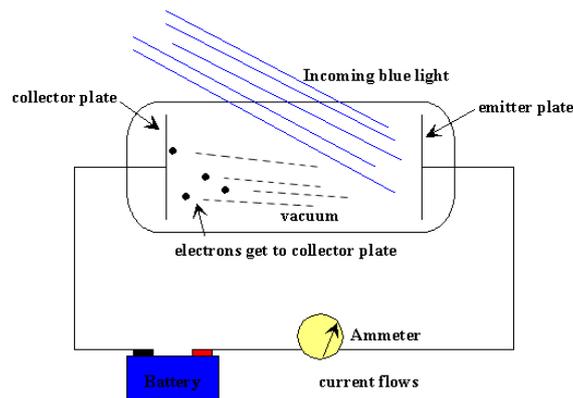
Wieso fallen die Elektronen einfach nicht aus dem Metall?

Es gibt eine bestimmte Energie für die Freisetzung eines Elektrons vom Metall – *die Austrittsarbeit* ϕ (in der Energieschema ist das der Unterschied zwischen der Fermienergie und das Vakuumniveau)



Experimentelle Methoden um die Austrittsarbeit zu bestimmen

Wie kann man die Austrittsarbeit messen? *Der photoelektrischer Effekt*



Licht wird auf einer Metallplatte (Kathode) gestrahlt

Wenn die Energie des Lichtes ($h\nu$) über einen **Schwellwert** (Austrittsarbeit) ist fließt ein Photostrom zwischen Anode und Kathode (Lichtintensität – Stromdichte; Photonenergie – Hinweis auf die Austrittsarbeit)

Die kinetische Energie der emittierten Elektronen ist

$$\frac{1}{2} m v^2 = q V_{stop}$$

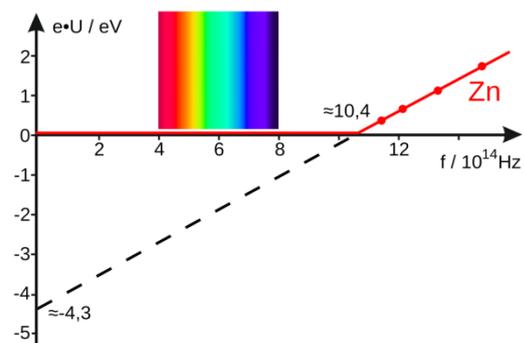
V_{stop} ist die Spannung zwischen den Platten, um den Strom zu stoppen. Je höher die Photonenergie (Frequenz), desto höher die KE der Elektronen zwischen den Platten, und V_{stop} nimmt mit Photonenergie zu.

Die Daten von einer Experiment Photonenergie gegen V_{stop} :

Die Austrittsarbeit kann vom Achsenabschnitt bestimmt werden

$$\frac{1}{2} m v^2 = q V_{stop} = h \nu - \Phi$$

Das ist das Prinzip hinter *Photoelektronenspektroskopie*.

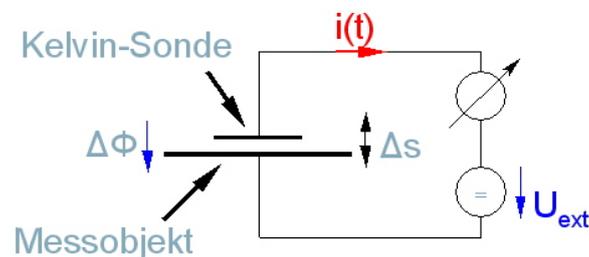


Noch eine Methode ist die *Kelvinsonde*. Hier wird das Kontaktpotential zwischen zwei Materialien gemessen. Das Kontaktpotential entsteht durch eine Änderung des chemischen Potentials der Materialien.

Kelvinsonde - Kantilevertip oder -netz aus einem Material mit einer gutdefinierten Austrittsarbeit wie Au

Messprinzip – Kelvinsonde wird über die Probe gefahren mit periodischer Änderung des Abstands und das Kontaktpotential wird gemessen

Physikalisches Prinzip – wenn zwei Metalle (Materialien) in Kontakt sind, fließen die Elektronen vom elektronenreichen zu Elektronenarmen Material. Dabei entsteht ein elektrisches Potential zwischen den Materialien. Wenn die Austrittsarbeit der Kelvinsonde bekannt ist, kann die Austrittsarbeit der Probe aus dem Kontaktpotential gerechnet werden



Das Prinzip kann man von der freien Energie des Systems verstehen. Man verursacht eine Änderung des chemischen Potentials ($\mu_i dN_i$) durch den Elektronfluß zwischen Probe und Tipp. Dabei entsteht ein elektrisches Potential, das man misst.

$$TdS = dU + pdV - \sum_{i=1}^k \mu_i dN_i + \sum_{i=1}^n X_i da_i + \dots$$

Das Drude-Modell für elektrische Leitfähigkeit in Metallen

Der deutsche Physiker Paul Drude hat ein klassisches Modell in 1900 entwickelt, um metallische Leitfähigkeit zu beschreiben. Das Modell ist basiert auf das Bild, dass wir uns gerade angeschaut haben. Im Drude-Modell sind die zusätzlichen Annahmen

- Nicht wechselwirkende Elektronen in einem Gitter positiver Ionen
- Elektronen werden durch instantanen Kollisionen mit Ionen gestreut, dabei wird die Richtung der Elektronenbewegung geändert
- Elektronen erreichen thermisches Gleichgewicht durch die Kollisionen (Thermalisierung)

Thermische Effekte für Elektronenbewegung

n_0 ist Gesamtzahl der Elektronen. Elektronen haben in einer Zeit t eine Wahrscheinlichkeit dt/τ eine Kollision zu haben. Die Zahl der Elektronen die noch KEINE Kollision nach Zeit t haben ist

$$n_t = n_0 \exp(-t / \tau)$$

Kollision passieren nach Zeit t , und die Kollisionsrate ist $d(n_t/dt)$

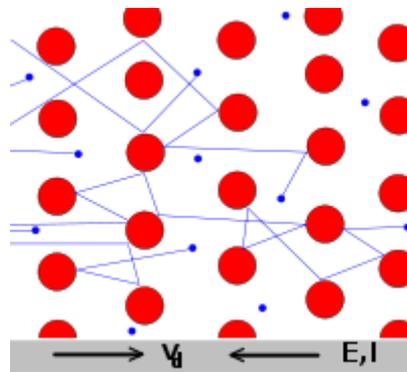
$$-\frac{dn_t}{dt} = \frac{n_0}{\tau} \exp(-t / \tau)$$

τ ist die Relaxationszeit (Zeit zwischen Kollisionen)

Elektronenbewegung in einem elektrischen Feld

In einem elektrischen Feld (Spannung über die Probe) entsteht zusätzlich eine Driftbewegung der Elektronen. Die Driftgeschwindigkeit der nicht gestreute Elektronen nach Zeit t ist

$$v_D = \left(\frac{-eE\tau}{m} \right)$$



Beschreibung der Elektronenbewegung und Stromdichte

Wir kombinieren die thermischen und Driftkomponenten der Elektronenbewegung

Für eine Elektronendichte n/m^3 im Metall ist die Stromdichte $J = q \cdot n \cdot \text{Elektronengeschwindigkeit}$

$$J = (-en\Delta v) = (ne^2\tau E / m)$$

Von das Ohmsche Gesetz

$$J = \sigma E$$

Können wir die Leitfähigkeit σ mit den thermischen und Driftkomponenten der Elektrobewegung beschreiben

$$\sigma = ne^2\tau / m$$

Das Drude-Modell bestätigt die experimentelle Beobachtung über einen bestimmten Temperaturbereich, und für manche Werte von n und m .

SLIDE n, T

Das Drude-Modell beschreibt keine explizite Temperaturabhängigkeit der Leitfähigkeit. Aber für Metalle beobachtet man, dass die Leitfähigkeit eine $1/T$ Abhängigkeit zeigt.

Die Thermalisierung der Elektron ist aber T -abhängig. Die mittlere freie Weglänge λ beschreibt die Distanz, die ein Elektron zwischen Kollisionen zurücklegt.

$$\lambda = v_{th}\tau$$

v_{th} ist die thermische Geschwindigkeit von der kinetische Energie der Elektronen.

$$3/2k_B T = 1/2mv_{th}^2$$

So die Leitfähigkeit ist jetzt

$$\sigma = \frac{ne^2\mu\tau}{m} = \frac{ne^2\lambda}{(3mk_B T)^{1/2}}$$

Wir sehen jetzt ein $T^{1/2}$ Abhängigkeit, aber nicht das beobachtete $1/T$ Verhalten.

Im Gleichgewicht gleichen die thermischen Effekte sich aus, so dass kein Strom fließt. Wenn eine Spannung angelegt wird, tragen die thermische effekte zum Widerstand ($1/\sigma$) des Materials bei – und verringern den Driftstrom (τ).

Das Drude-Lorenz-Modell für elektrische Leitfähigkeit

Das Drude Modell könnte ziemlich viele experimentelle Eigenschaften für die elektrische Leitfähigkeit von Metallen erklären. Die Temperaturabhängigkeit der Leitfähigkeit aber nicht. Lorenz hat das Modell erweitert, in dem er die Geschwindigkeitsverteilung (nach Boltzmann-Theorie) angeschaut hat.

Drude hat angenommen, dass alle Elektronen die gleiche Geschwindigkeit besitzen. Elektronen haben aber nicht alle die gleiche Energie/Geschwindigkeit. Lorrenz hat das erkannt, und hat eine Verteilung der Energien/Geschwindigkeiten der Elektronen im Modell berücksichtigt.

Die kinetische Energie (von der Temperatur des Systems abhängig) eines Elektrons ist

$$KE = \frac{1}{2} m v_{th}^2$$

Wo v_{th} ist die thermische Geschwindigkeit.

Jetzt schauen wir n Elektronen mit eine Geschwindigkeitverteilung, die von Temperatur abhängt.

$$f_{\mathbf{v}}(v_x, v_y, v_z) = \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} \exp \left[-\frac{m(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2)}{2kT} \right],$$

Wenn ein E-Feld angeschaltet wird, ändert sich f wegen Drift und Streuungseffekte

$$\left(\frac{df}{dt} \right) = \left(\frac{df}{dt} \right)_{field} + \left(\frac{df}{dt} \right)_{scattering}$$

Das E-Feld beschleunigt die Elektronen, und die Streuung bremst die.

Beitrag vom elektrischen Feld

f wird durch Änderung in Elektronenimpuls $m\mathbf{v}$ beeinflusst, und durch $\mathbf{E} = -q\mathbf{E}$

$$\left(\frac{df}{dt} \right)_{field} = \left(\frac{\partial v}{\partial t} \right) \left(\frac{\partial f}{\partial v} \right) = \left(\frac{-q}{m} E \right) \left(\frac{\partial f}{\partial v} \right)$$

Beitrag von Streuung

f_0 – die Ursprüngliche Verteilung. Streuung minimiert die Differenz ($f-f_0$) vom E-Feld durch die Relaxionszeit τ_r . Das ist analog zu τ vom Drude-Modell, nur jetzt ist τ_r ortsabhängig und im Drude-Modell war die konstant.

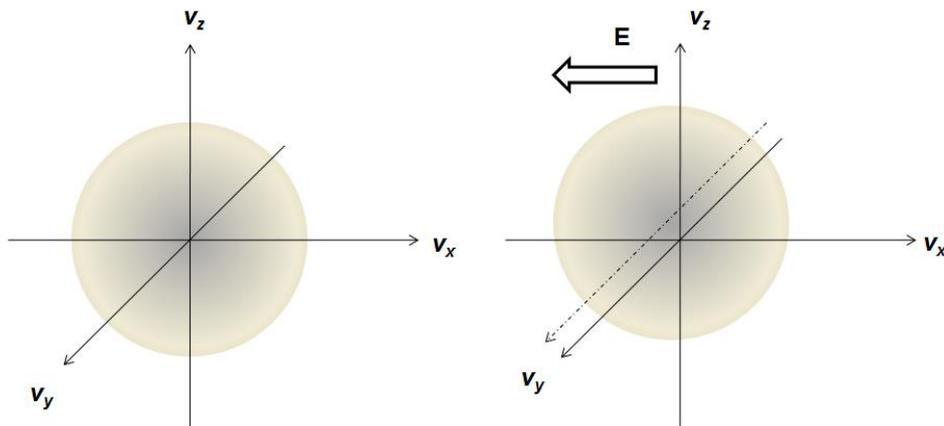
$$\left(\frac{df}{dt} \right)_{scattering} = (f_0 - f) / \tau_r$$

Bei constantem E-Feld für Zeiten länger als τ_r kommt das System im Gleichgewicht und wir können die Verteilung so beschreiben

$$\left(\frac{df}{dt}\right) + \left(\frac{q}{m} E\right) \left(\frac{\partial f}{\partial v}\right) + \frac{f - f_o}{\tau_r} = 0$$

oder

$$f = f_o + (\tau_r q E / m) (\partial f / \partial v)$$



Das beschreibt wie die Verteilung vom E-Feld verschoben wird – von der Gleichgewichtsposition. Die Streuung wirkt dagegen.

Die Form der Verteilung wird durch das Verhältniss zwischen Verschiebung (E-Feld) und Verformung (Streuung) ab. In Metallen, die guten elektrischen Leiter sind, ist die Verschiebung größer als die Verformung.

Jetzt können wir das Ohmsche Gesetz vom Lorenz-Modell schreiben

$$J_x = \sigma E_x = - \int e v_x f dv = - \int e v_x (\tau_r e E / m) (\partial f / \partial v) dv$$

Das Integral ist etwas kompliziert zu lösen (wegen der Richtungsabhängigkeit der Geschwindigkeit). Wir können einfach die folgenden Annahmen machen:

$$\tau_r = \lambda / |v|$$

Wo λ die mittlere freie Weglänge des Elektrons ist, und v ist die Geschwindigkeit (Richtungsunabhängig). Langsame Elektronen werden mehr gestreut als schnellere.

Wir können dann (nach einige Schritte die hier nicht ausgeführt sind) das Integral lösen, und das Ergebniss des Lorenz Modells für die Leitfähigkeit ergibt

$$\sigma = \frac{4ne^2 \lambda}{3(2\pi m k_B T)^{1/2}}$$

Das ist ein sehr ähnliches Ergebnis zum Drude Modell. Allerdings ist λ auch Temperaturabhängig. Die beobachtete $1/T$ Abhängigkeit der Leitfähigkeit kann dadurch mit dem Modell beschrieben werden.

Thermische Leitfähigkeit und das Wiedermann-Franzsesches-Gesetz

Das Modell des Elektronengases kann auch benutzt werden, um die hohe thermische Leitfähigkeit in Metallen zu verstehen.

In einem idealen Gas (nicht wechselwirkende, klassische Teilchen) ist die Wärmeleitfähigkeit

$$\kappa = \frac{n \langle v \rangle \lambda c_V}{3 N_A}$$

Labels in the diagram:
 - κ : Thermal conductivity
 - n : Particles per unit volume
 - $\langle v \rangle$: Mean particle speed
 - λ : Mean free path
 - c_V : Molar heat capacity
 - $3 N_A$: Avogadro's number

wo

$$c_V = \frac{3}{2} R = \frac{3}{2} N_A k$$

und

$$\begin{array}{ll} \text{Conductivities} & \kappa = \frac{n \langle v \rangle \lambda k}{2} \qquad \sigma = n e^2 \lambda / m \langle v \rangle \\ & \text{Thermal} \qquad \qquad \qquad \text{Electrical} \end{array}$$

wo

$$\langle v \rangle = \sqrt{\frac{8kT}{\pi m}}$$

Das ergibt

$$\frac{\kappa}{\sigma} = \frac{4k^2 T}{\pi e^2} \quad \text{is in the form of the Wiedemann-Franz Law} \quad \frac{\kappa}{\sigma} = LT \quad \text{but the constant is wrong!}$$

L – ist die Lorenz-Zahl, und nach dieser Theorie soll die konstant sein, und gleich für alle Materialien (keine Materialparameter in der Gleichung)

SLIDE Lorenz-Zahl

Wenn wir man die Quanteneigenschaften der Elektronen berücksichtigen, kommen wir auf eine bessere Beschreibung der thermische Leitfähigkeit von Metallen.

Ladungsträger Mobilität

Neben der Leitfähigkeit, ist die Mobilität oder Beweglichkeit der Elektronen ein wichtiges Materialparameter. Die Mobilität beschreibt die Geschwindigkeit eines Elektrons/elektrisches Feld Einheit.

$$\mu = (-v / E)$$

$$[\mu] = m^2 / Vs$$

Vom Drude-Modell ergibt das

$$\mu = (-v / E) = e\tau / m$$

$$\mu = ne\sigma$$

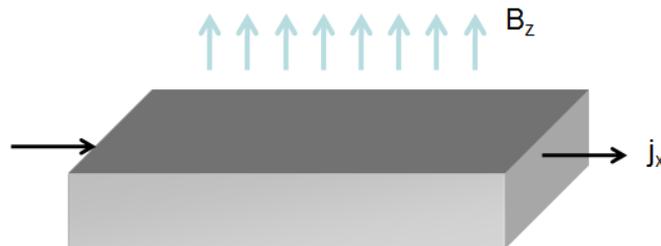
Der Hall-Effekt

Die Hall-Konstante und -Mobilität

Der Hall-Effekt ist eine Methode um Ladungsträgermobilität, und das Vorzeichen von der Ladung im Material zu bestimmen.

Wir stellen uns einen rechteckigen Leiter vor. Eine Spannung in der x-Richtung über den Leiter angelegt, und das ergibt eine Stromdichte in der x-Richtung j_x .

Ein B-Feld wird senkrecht in der z-Richtung angeschaltet, B_z .



Wie wird der Stromrichtung vom B_z beeinflusst?

Die Kraft an eine Ladung, $-q$ (Elektronen), mit Geschwindigkeit, v , von einem elektromagnetischen Feld wird durch die Lorentzkraft beschrieben

$$F = -q[\vec{E} + (\vec{v} \times \vec{B})]$$

Für den Strom im Leiter die Kraft von B_z ergibt ein Komponent in der y-Richtung

$$F_y = -q(\vec{v}_D \vec{B})$$

Und die Ladung wird in der (negativen) y-Richtung vom B_z abgelenkt



Das führt zur Akkumulation negativer Ladung (Elektronen) an einer Seite des Leiters, und einem Mangel von Ladung (effektiv positive Ladung, oder Ionen) an der ander Seite



Dadurch entsteht ein elektrisches Feld über den Leiter in der y-Richtung – das ist das Hall-Feld E_y .

Das ist der Hall-Effekt. Aus E_y können wir weitere Materialparameter, wie μ und q bestimmen.

Im Gleichgewicht ist die Kraft von E_y und von B_z an der Ladung ausgeglichen:

$$F = -q[\vec{E} + (\vec{v} \times \vec{B})] = 0$$

$$-qE_y = -qv_D B_z$$

Man kann dann die Mobilität bestimmen

$$\mu = v_D / E_x$$

$$E_y = \mu E_x B_z$$

Normalerweise wird das Hallkoeffizient als Materialparameter angegeben

$$R_{Hall} = \frac{E_y}{B_z j_x}$$

R_{Hall} ist eine Konstante, da B_z konstant ist, und Änderungen in E_y sind proportional zu Änderungen in j_x . Oder von

$$j_x = \sigma E$$

$$E_y = \mu E_x B_z$$

können wir schreiben

$$R_H = \frac{\mu E_x B_z}{B_z \sigma E_x} = \frac{\mu}{\sigma}$$

Und R_{Hall} ist eine Konstante, die die Proportionalität zwischen Mobilität und Leitfähigkeit beschreibt.

Wir können das noch einfacher ausdrücken, weil:

$$\sigma = -qn\mu$$

und so

$$R_H = -\frac{1}{qn}$$

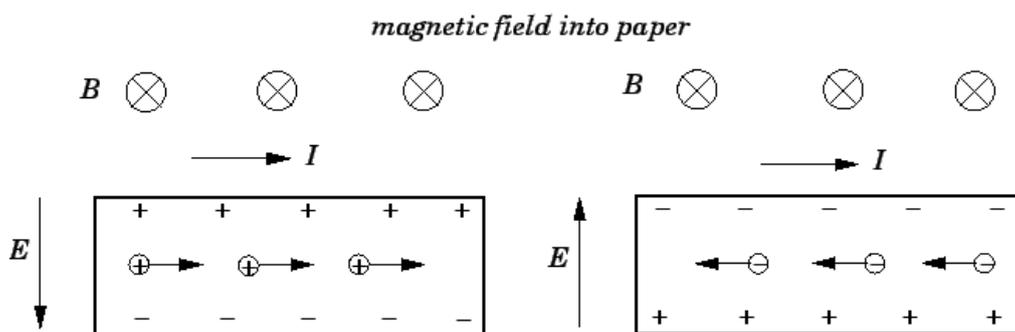
Das Vorzeichen der Hall-Konstante – positive und negative Ladung

Bis jetzt haben wir angenommen, dass die Ladung q ist negativ (Elektronen in Metallen). Was passiert wenn wir positive Ladung (möglich in Halbleiter – *Löcher*) haben?

j_x – fließt entweder in der positiven oder negativen x-Richtung, je nach Ladung

F_y – die Lorenz-Kraft wirkt in die gleiche Richtung, egal welche Ladung (hängt von q und v_D ab, und beide ändern Vorzeichen für Elektron/Löcher)

E_y – ändert die Richtung von positiv zu negativ Ladung



R_H - ändert die Richtung von positiv zu negativ Ladung

Früher wars garnicht bekannt wieso manche Materialien eine positive und manche eine negative Hall-Konstante hatten.

Halbleiter – positiv oder negativ je nach Dotierung. Metalle?

[SLIDE Hall-Daten](#)

Quantisierte freie Elektrontheorie

Das Modell des freien Elektronengas aus der klassischen Sicht hat einige experimentelle Beobachtungen erklären können

- Elektrische Leitfähigkeit von Metallen
- Beziehung zwischen elektrischer und thermischer Leitfähigkeit

Aber einige Sachen bleiben unklar

- Temperaturabhängigkeit der elektrischen (zum Teil durch Lorenz erklärt) und thermischen Leitfähigkeit (nicht konstante Lorenz-Zahl)
- Unterschiede in Lorenz-Zahlen zwischen Materialien
- Unterschiedliche Vorzeichen für die Hallkonstante in Metallen

Um diese Eigenschaften zu erklären müssen wir die quanten-Eigenschaften von Elektronen berücksichtigen.

Elektronen sind *Fermionen* mit spin $\frac{1}{2}$. Nur ein Fermion / Quantenzustand. Für uns ist nur wichtig zu wissen, dass wir berücksichtigen müssen

- maximal 2 Elektronen /Energiezustand haben können – spin up und spin down (Pauli)
- Wellen/Teilchen Dualismus

Systeme von Elektronen – die Fermi-Dirac-Verteilung

Wir schauen erstmal die Eigenschaften von einem System von Elektronen. Die Bedingung, dass max. 1 Elektron/Quantenzustand (2 e- / Energiezustand) möglich ist, bestimmt die Verteilung von Elektronen.

Für klassische Teilchen, die Maxwell-Boltzmann-Verteilung beschreibt die Wahrscheinlichkeit, dass ein Teilchen die Energie (E) hat

$$f(E)_{MB} = \frac{1}{A \exp(E/kT)} = \exp(-E/kT)$$

A – Normierungskonstante;

Die Wahrscheinlichkeit für die Besetzung höherer Energieniveaus ist weniger wahrscheinlich. Besetzung hängt von der Temperatur ab. Die Verteilung hält nur für große Systemen von Elektronen, so dass +/- ein Elektron vom System die Gesamtsystemenergie nicht beeinflusst.

Jetzt wenn wir die Bedingung für Besetzung für die Fermionen benutzen, bekommen wir die Fermi-Dirac-Verteilung

$$f(E)_{FD} = \frac{1}{A \exp(E/kT) + 1} = \frac{1}{\exp(E - E_F / kT) + 1}$$

Für Fermionen, A hat eine besondere physikalische Bedeutung

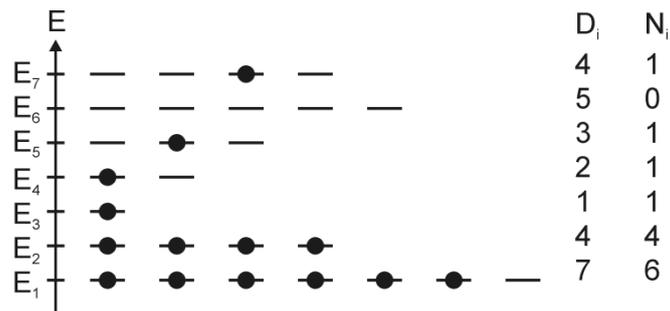
$$A = \exp(-E_F / kT)$$

Fermi Energie: Bei $T = 0\text{K}$ alle Energieniveaus sind bis der Fermi Energie (E_F) besetzt, und alle mit $E < E_F$ sind unbesetzt. Der Wert von E_F hängt von der Zahl von Elektronen ab.

$$E \leq E_F; f(E) = 1$$

$$E \geq E_F; f(E) = 0$$

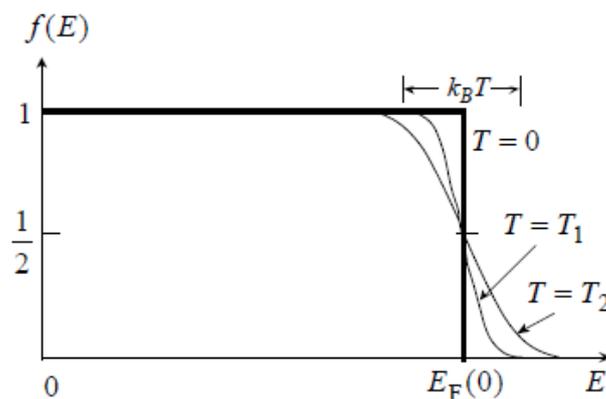
Fermi-Niveau: Bei $T > 0\text{K}$, sind einige Energieniveaus bei $E > E_F$ besetzt (thermische Energie) und dafür, einige Energieniveaus bei $E < E_F$ unbesetzt.



Was ist die Wahrscheinlichkeit für die Besetzung von $E = E_F$ bei $T < 0\text{K}$?

$$f(E)_{FD} = \frac{1}{\exp(E_F - E_F / kT) + 1} = \frac{1}{1 + 1} = 1/2$$

Man kann das von der graphischen Darstellung besser verstehen



Die Wahrscheinlichkeit der Besetzung von Energieniveaus $E \ll E_F$ ist $f(E) = 1$, und die Wahrscheinlichkeit der Besetzung der Energieniveaus $E \gg E_F$ ist $f(E) = 0$. Nur Elektronen mit Energie um E_F sind „beweglich“ in Energie (thermisch aktiviert). Für die elektrische und thermische Leitfähigkeit ist das sehr wichtig. Es bedeutet, dass nur ein kleiner Bruchteil der Elektronen zu diesen Größen beitragen.

Sommerfeld-Modell für elektrische Leitfähigkeit

Sommerfeld hat das Drude-Lorenz erweitert, und die Elektronen als Fermionen behandelt. Er hat die Maxwell-Boltzmann-Verteilung mit der Fermi-Dirac-Verteilung ersetzt – quantisiertes Elektronengas.

Der große Unterschied, ist dass nur Elektronen mit $E \sim E_F$ tragen zur elektrischen (und thermischen) Leitfähigkeit bei. Elektronen mit $E < E_F$ können ihre Energie nicht ändern (alle Zustände in der energetischen Nähe besetzt) und $E > E_F$ ist nicht besetzt.

Die Leitfähigkeit ist jetzt (in Abhängigkeit E statt v_{TH})

$$\sigma = -\frac{ne^2}{m\nu(\epsilon_F)} \int_0^\infty \frac{\lambda\epsilon}{\epsilon_F} (\partial f / \partial \epsilon) d\epsilon$$

Die Funktion $f(E)$ ist 0 für die meisten E -Werte, und $0 < f(E) < 1$ für $E \sim E_F$ so das Integral ergibt

Oder in Abhängigkeit der Relaxionszeit

$$\sigma = \frac{ne^2 \lambda(\epsilon_F)}{m\nu(\epsilon_F)}$$

$$\tau_m = [\lambda(E_F) / s(E_F)]$$

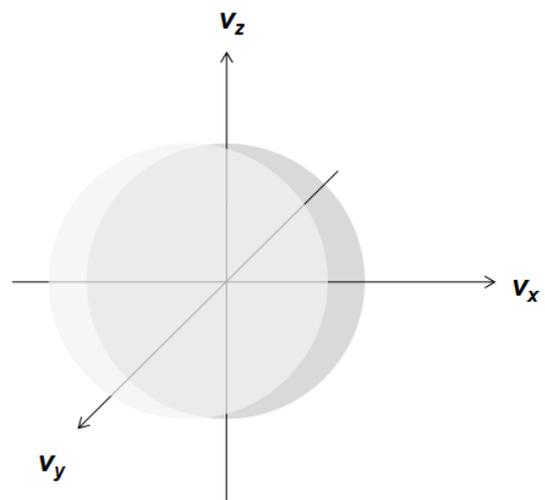
$$\sigma = ne^2 \tau_m / m$$

(Vergleich mit Drude-Lorenz)

$$\sigma = \frac{ne^2 \mu \tau}{m} = \frac{ne^2 \lambda}{(3mk_B T)^{1/2}}$$

Die Leitfähigkeit ist abhängig von

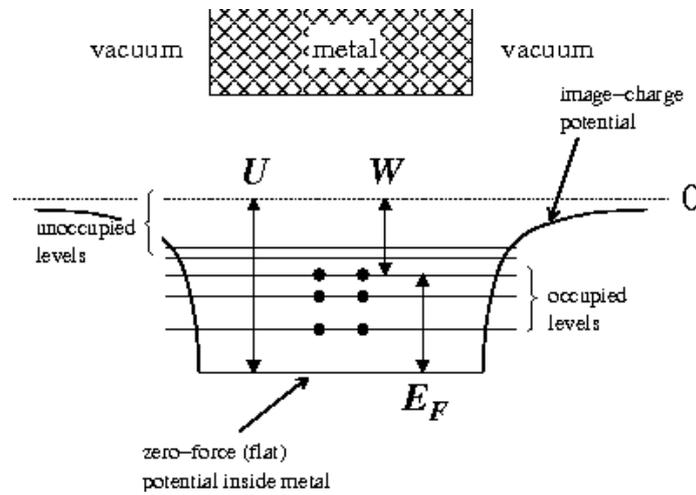
- Ladungsträgerdichte n
- Elektronmasse m
- Elektronengeschwindigkeit s
- Mittlere freieweglänge
- Fermi-Energie E_F



Ein elektrisches Feld verursacht die Verschiebung der Fermi-Fläche um E_F in die Richtung des Feldes.

Wie können wir E_F physikalisch verstehen?

Die Austrittsarbeit ϕ ist die Energie, die wir verwenden müssen, um ein Elektron aus einem Metal zu befreien. $q\phi \sim E_F$ (es gibt einige Oberflächeneffekte usw, die auch ϕ beeinflussen).



Von unserer Behandlung Elektronengase bis jetzt, könnten wir naive glauben, dass die Austrittsarbeit nur von der Dichte der Elektronen im Metall abhängt. Wir werden aber gleich sehen, dass wir auch die Struktur des Kristallgitters berücksichtigen müssen, um vollständig die erlaubte Energieniveaus der Elektronen zu verstehen.

SLIDE AUSTRITTSARBEIT – Verschiedene Orientierung

Supraleitung

Die Supraleitung wurde in 1911 von Kamerlingh Onnes beobachtet. Onnes hat als erster He verflüssigt, und das hat ihm das Tieftemperaturverhalten verschiedener Materialien zu untersuchen. Onnes hat den temperaturabhängigen Widerstand von Hg gemessen, und eine lineare Abnahme bis 4.2 K beobachtet. 4.2 K ist die kritische Temperatur von Hg, bei dieser Temperatur fällt der Widerstand auf 0, trotz Defekte im Material.

Seit dem wurden viele Materialien untersucht. Etwa die Hälfte alle Metallen sind Supraleiter bei tiefer Temperatur, und einige Isolatoren auch.

Supraleiter haben die folgenden Eigenschaften:

- $R = \text{endlich}$ bei $T \geq T_c$ und unendlich bei $T \leq T_c$ (bzw Leitfähigkeit....)
- Supraleiter sind perfekte *Diamagneten*

Supraleiter in magnetischen Felder

Die Stärke eines B-Felds in einem Material ist

$$\mathbf{B} = \mathbf{B}_o + \mu_o \mathbf{M} = \mu_o (\mathbf{H} + \mathbf{M})$$

wo

B_o = externes B-Feld

μ_o - magnetische Permittivität des Materials

M – Magnetischer Moment/Volume

H – Magnetische Feldstärke = B/μ_o

Für perfekte Diamagneten $\mathbf{B} = \mathbf{0}; \mathbf{M} = -\mathbf{H}$

Das ist eine wichtige Eigenschaft von Supraleiter. Es erlaubt die Beschreibung des Zustands des Supraleiters von B und T alleine. Um das zu verstehen, vergleichen wir die Eigenschaften eines „idealen Leiters“ mit den Eigenschaften eines Supraleiters.

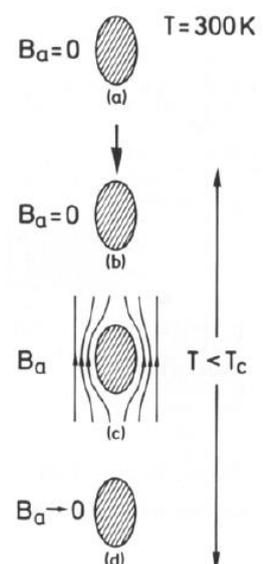
Idealer Leiter: $R = 0$ für $T \leq T_c$. Nicht perfekt diamagnetisch.

Experiment 1: Wir fangen an bei

a) $B_o = 0$ und $T = 300K$

b) abkühlen bis $T < T_c$ so dass $R = 0$

c) B_a angeschaltet. Das induziert einen Strom so $M = -H$, um die Änderung des B-Felds entgegen zu wirken. Wegen der unendlichen Leitfähigkeit bleibt der Strom konstant. Die Feldlinien von B_a sind komplett aus dem Leiter



ausgestossen.

d) B_a wird ausgeschaltet und der Strom fällt ab

Situation 2: Wir fangen an bei

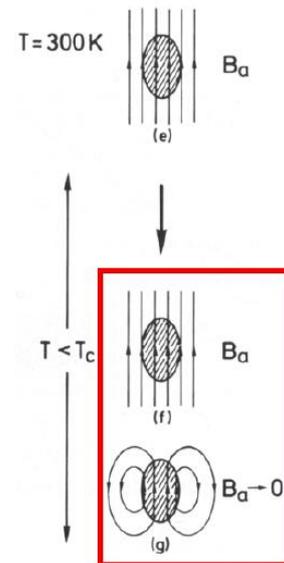
e) $B_o = B_a$ und $T = 300K$

f) Abkühlen bis $T < T_c$ und $R = 0$. $B_o = B_a$

g) B_a abgeschaltet und ein Strom ist induziert im Leiter wegen Änderungen im B. $R = 0$ bleibt und der Strom fließt weiter.

Das ist merkwürdig. Das bedeutet, dass die magnetischen Eigenschaften eines idealen Leiters pfad-abhängig sind, und nicht alleine durch B und T bestimmt werden können.

Superconductor: $R = 0$ für $T \leq T_c$ und jetzt $\mathbf{M} = -\mathbf{H}$



Situation 1:

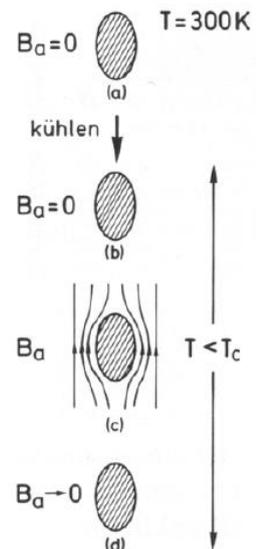
a) $B_o = 0$ und $T = 300K$

b) abkühlen bis $T < T_c$ so dass $R = 0$

c) B_a angeschaltet. Das induziert einen Strom so $\mathbf{M} = -\mathbf{H}$, um die Änderung des B-Felds entgegen zu wirken. Wegen der unendlichen Leitfähigkeit bleibt der Strom konstant. Die Feldlinien von B_a sind komplett aus dem Leiter ausgestossen.

d) B_a wird ausgeschaltet und der Strom fällt ab

Genau das gleiche wie beim idealen Leiter



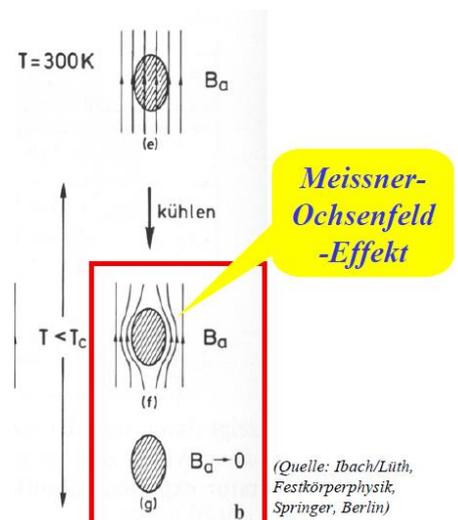
Situation 2:

e) $B_o = B_a$ und $T = 300K$

f) abkühlen bis $T < T_c$ so dass $R = 0$. $\mathbf{M} = -\mathbf{H}$ so die B-Feldlinien sind ausgestossen.

g) B_a abgeschaltet, und wir sind jetzt im gleichen Ausgangszustand wie in Situation 1.

Die Eigenschaften eines perfekten Diagnetes kann mit B und T beschrieben werden, unabhängig von vorherigen Parametern.



Das ist der **Meissner effect**. Supraleiter sind perfekte Diamagneten ($\chi = -1$). B-Feldlinien werden vollständig aus dem Inneren des Supraleiters ausgestossen.

Wenn B groß genug wird, dringen die B-Feldlinien in den Supraleiter ein, und der supraleitende Zustand bricht zusammen. Das kritische B-Feld (B_c) ist ein Materialparameter. B_c ist Temperaturabhängig, und ist maximal für $T = 0K$ und wird geringer bei $T \sim T_c$.

$$B_c = B_o \left[1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^2 \right]$$

Slide B_c vs T

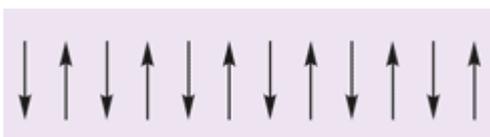
Thermodynamik der Supraleitung

Supraleitung ist ein *Phasenübergang (2te Ordnung)*. Bei einem kritischen Wert eines äusseren Parameters (T) ändern sich die Eigenschaften des Systems. Ein zusätzlicher Parameter wird benötigt, um die Eigenschaften des neuen Zustands zu beschreiben. Ein Sprung in einem der thermodynamischen Größen (V, P, c_v) wird beobachtet beim kritischen Wert.

Die Ordnung in dem supraleitenden Zustand ist höher als in nicht supraleitenden Zustand, analog zu ferromagnetismus



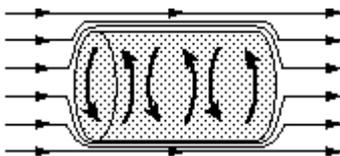
antiferromagnetismus



Slide S vs. T

Energiedifferenz zwischen dem normalen und supraleitenden Zustand

Ein Zylinder mit ($B < B_c$), $M = -\mu_o H$



Die Energie, um B zu ändern von $B = 0$ auf $B = B$ ist

$$E = - \frac{B^2}{2\mu_o}$$

Die Energie des Supraleiters nimmt zu

$$F_s = \frac{B^2}{2\mu_0}$$

Beim $B = B_c$, es gibt einen Übergang vom supraleitenden zu normalen Zustand

$$F_n - F_s(0) = -\frac{B_c^2}{2\mu_0}$$

Das ist der Energiegewinn durch den Übergang vom normalen zum supraleitenden Zustand.

Wir können zeigen, dass die Entropie des Systems abnimmt, beim Übergang zum Supraleit.

$$S = -\left(\frac{dF}{dT}\right)_W$$

$$S_s - S_n = B_c(T = 0K) \left(\frac{\partial B_c(T)}{\partial T}\right)$$

Wir wissen schon, dass B_c nimmt mit steigende Temperatur ab

$$\partial B / \partial T < 0$$

$$S_s < S_n$$

Der supraleitende Zustand ist geordenter als der normale Zustand.

$$T \rightarrow T_c$$

$$H_c \rightarrow 0$$

$$S_n = S_s$$

Ohne Absorption oder Emission von Wärme – typisch für eine 2te Ordnungphasenübergang.

Wir wissen, dass der Übergang mit der elektrischen Leitfähigkeit zusammenhängt. Das heisst, dass die Zunahme in Ordnung mit der elektronischen Struktur zusammenhängt.

BSC-Theorie – die mikroskopische Beschreibung

Bardeen-Schrieffer-Cooper Theorie (1972 Nobel Prize).

Bei dem Übergang vom normalen zum supraleitenden Zustand werden *Cooper-Pairs* formiert. Das sind Elektronpaare, die im *Impulsraum* über Gitterschwingungen (*Phononen*) wechselwirken. Die negativ geladene Teilchen ziehen sich an.

Schrieffer – theoretisch gezeigt, dass

Elektronpaare $E < E_F$ besitzen.

Die Bindung zwischen den Elektronen ist schwach und verschwindet durch thermische Effekte.

Das Elektronpaar hat Spin 1, und ist ein *Boson*

Bosonen verhalten sich ganz besonders bei tiefer Temperatur. Das kann man von der Bose-Einstein-Verteilung erkennen

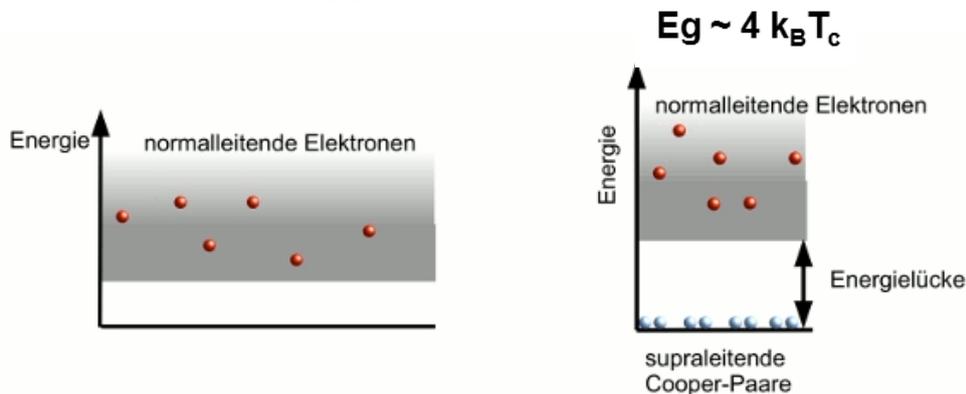
$$f(E)_{BE} = \frac{1}{\exp(E/kT) - 1}$$

Die Cooper-Paare bilden ein Bose-Kondensat (ein gemeinsamer Grundzustand) unter T_c .

$$\psi(r) = \sqrt{n_s} \exp(i\rho r)$$

n_s = Dichte der Supraleitenden Elektronen

ρ = Phase (Räumliche abhängig)



Die London-Gleichungen

Die London-Gleichungen (von den London Brüdern) erklären das Verhalten eines Supraleiters in einem EM-Feld. Die sind intuitiv von den empirischen Beobachtungen hergeleitet worden, und erklären den Meissner-Effekt.

Die Gesamt Elektronendichte in einem Supraleiter besteht aus "normalen" (n_n) und "supraleitenden" (n_s) Elektronen. Die Dichten sind T-abhängig, und bei $T = 0$ alle Elektronen sind Supraleitend.

$$n = n_s + n_n$$

$$n = n_n @ T > T_c$$

$$n = n_s @ T < T_c$$

Die 1te London-Gleichung

Beschreibt den *Superstrom* im E-Feld

$$m \frac{dv_s}{dt} = eE$$

Die Superstromdichte ist

$$j_s = n_s e v_s$$

so

$$E = \frac{m}{n_s e^2} \frac{dj_s}{dt} = \Lambda \frac{dj_s}{dt}$$

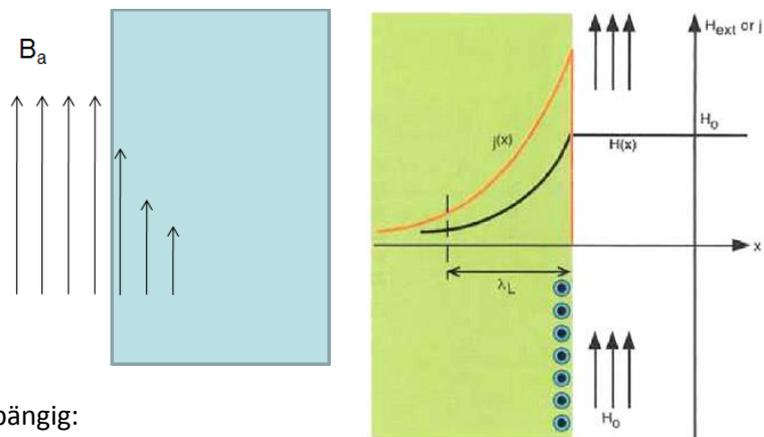
Die 2te London-Gleichung

Wir wissen, dass im inneren des Supraleiters $B = 0$. Aber es gibt eine endliche Eindringtiefe von den Feldlinien, λ

$$\lambda = \sqrt{m \epsilon_0 c^2 / e^2 n_s}$$

$$B_i = 1/e B_a$$

$$B(x) = B_a e^{-x/\lambda}$$



Weil n_s T-abhängig ist, λ ist auch T-abhängig:

$$\frac{\lambda}{\lambda_0} = \sqrt{\frac{1}{1 - (T / T_c)^4}}$$

Die 2te London-Gleichung beschreibt den Superstrom in Abhängigkeit des B-Felds:

$$j_s = -\frac{1}{\lambda^2} A; B = \text{rot}A$$

Gemischte Zustände: Typ I & Typ II Supraleiter

Typ I Supraleiter

- elementare Metalle (Hg, Cu)
- niedrige T_c
- B_c führt zu einem schlagartigen Zusammenbruch des supraleitenden Zustands.

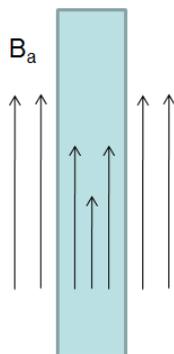
Typ II Supraleiter

- Legierung
- "Mischzustände" (normal/supraleitend) sind möglich
- 2 B_c werte – bei B_{c1} entstehen Mischzustände und bei B_{c2} bricht der SL-zustand zusammen
- Robuster gegen B_c und haben höher T_c als Typ I

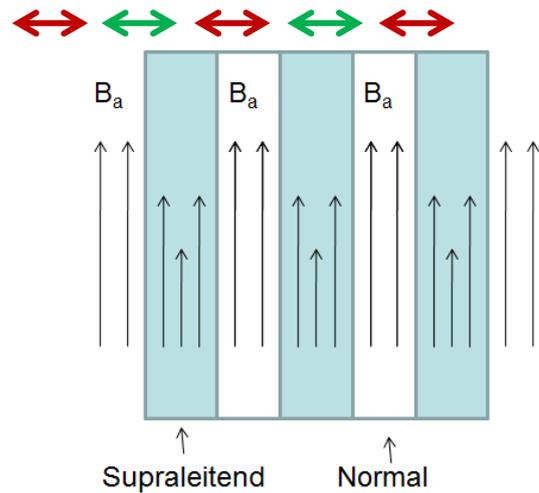
Wie entsteht der Mischzustand?

Dünner SL, $d < \lambda$. Der SL-Zustand bleibt erhalten, wenn $B_i > B_c$ ist

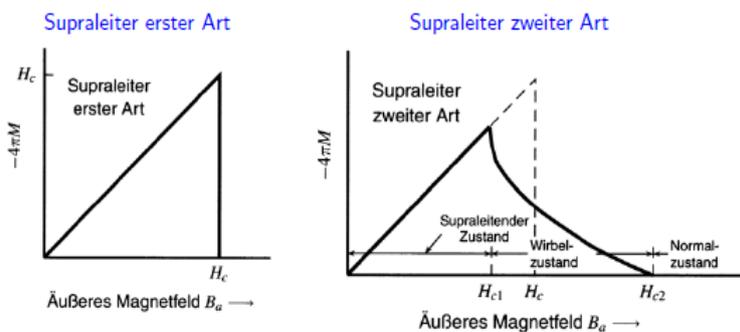
SL-noch vorhanden

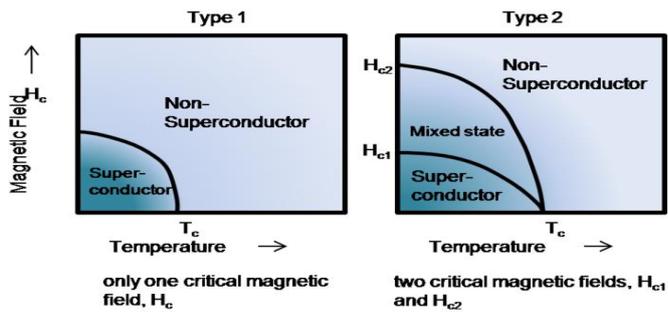


Eine Reihe von dünnen SL und normale Streifen



Im Mischzustand entstehen "Wirbel". B-Feldlinien fließen durch die Wirbel. Wenn die Wirbeldichte zu hoch wird, verschwindet das supraleitendes Verhalten.





Hängt von λ im Material ab!

Charakteristische Längen in Supraleiter

Es gibt 2 charakteristische Längen in der Supraleitung

- λ – Eindringtiefe der B-Feldlinien im SL (10 – 100 nm)
- ξ – Kohärenzlänge (10 – 1000 nm Typ I; 2-3 nm Typ 2) – räumliche Variation der Wellenfunktion. Eine minimale Länge über die Variationen in der SL-Elektronendichte passieren können ohne den SL-Zustand zu zerstören. Lang – nicht robust, kurz – robust.

Von BSC Theorie

$$\xi = \frac{2\hbar v}{\pi\Delta}$$

wo v – Geschwindigkeit der Cooper-Paare, Δ – Energielücke für SL

Das Verhältniss zwischen beiden Längen bestimmt wie das B-Feld der Quantenzustand des SL beeinflusst. Der Mischzustand entsteht in Typ 2 SL und nicht in Typ 1 weil

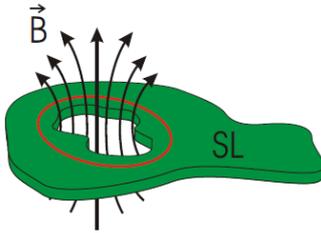
Type I: $\xi \gg \lambda$

Type II: $\xi \ll \lambda$

Material	Coherence length ξ_0 (nm)	London penetration depth λ_L (nm)	Ratio λ_L / ξ_0
Sn	230	34	0.16
Al	1600	16	0.010
Pb	83	37	0.45
Cd	760	110	0.14
Nb	38	39	1.02

B-Fluss Quantisierung

Der Mischzustand ist eine interessante Eigenschaft von Typ 2 SL. Es ist möglich das zu benutzen, um sehr genaue Änderung des B-Felds zu bestimmen.



Magnetischer Fluß Φ beschreibt das Komponent vom B, das durch eine Fläche dS fließt.

$$d\Phi = B dS$$

Die Einheiten sind Weber (Wb) [V/s] [B] = Wb/m² = Telsa

London hat vorgeschlagen, dass weil Supraleitung ein Quanteneffekt ist, muss auch der B-Feldfluss durch ein Wirbel quantisiert sein. Sein Vorschlag war

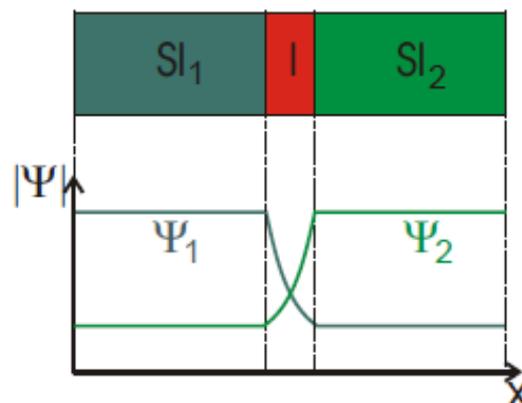
$$\Phi = (2\pi\hbar / q)$$

Weil die Cooper-Paare aus 2 Elektronen bestehen, ist die Ladung $e = 2q$. Experimentell wurde beobachtet, das die B-Feldlinien quantisiert sind mit faktor

$$\Phi = (\pi\hbar / e)$$

Josephson Übergang (Nobel prize 1973)

Der Josephson-Übergang besteht aus 2 SL, getrennt durch eine dünne Isolatorschicht. Die Supraelektronen können durch den Isolator tunneln..



Im Gleichgewicht, tunneln Cooper-Paare von 1 -2 und umgekehrt, so dass kein Gesamtstrom fließt.

Wenn der Übergang an einer Stromquelle angeschlossen wird, und ein geringer normaler Strom ($I < I_c$) im Schaltkreis fließt, ist der Suprastrom über den Übergang abhängig von der Phasendifferenz des Suprastroms

$$I = I_c \sin(\Delta\rho)$$

Wenn $I > I_c$, entsteht eine Spannung über den Übergang,

$$V = \frac{\hbar}{2e} \frac{\partial \rho}{\partial t}$$

Das ist ein makroskopischer Quanteneffek – wir können dadurch die Phase der Wellenfunktion des Suprastroms im Schaltkreis messen.

Application: Squids (superconducting quantum interference device)

Ohne B-Feld fließen I_a und I_b , und $I_a = I_b$

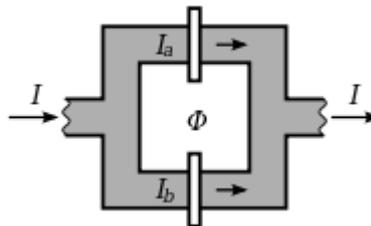
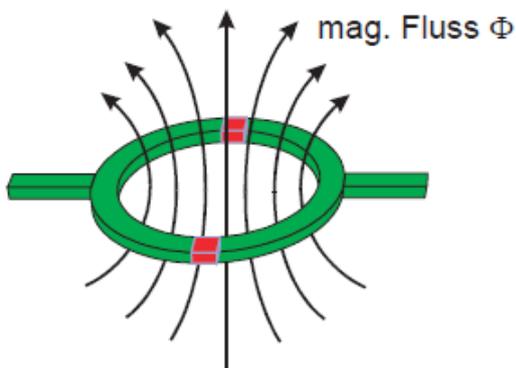
Wenn das B-Feld angeschaltet wird, dann ist I_s zusätzlich im Kreis induziert, so dass

$$I_a = I_a + I_s$$

$$I_b = I_b - I_s$$

Wenn $I_s + I_a = I_c$, dann gibt es V über den Übergang a.

Wenn B-Fluss = $n \phi/2$, I_s oszilliert, um zu gewährleisten $n\phi$, dass der B-Fluss immer ganzzahlig ist (quantisiert)



Elektronenbewegung in Kristallen – der Wellenvektor k

Wir haben jetzt in viel Detail die Verteilung von Elektronen in Energiezustände angeschaut. Jetzt ist es wichtig, dass wir das Wellen/Teilchen-Dualismus der Elektronen berücksichtigen. Die Bewegung von Leitungselektronen in Longitter wird von der Gitterstruktur sehr stark beeinflusst. Wir werden sehen, dass die Wechselwirkungen zwischen Elektronen und Gitter bestimmen ob ein Material ein Metall, Isolator oder Halbleiter ist.

Die kinetische Energie eines freien Elektrons ist

$$KE = \frac{1}{2}mv^2$$

und der Impuls ist

$$p = mv$$

so wir können die KE umschreiben als

$$KE = p^2 / 2m$$

De Broglie hat postuliert, dass wenn Licht Teilchen/Wellen-Dualismus besitzt, dann wird Materie auch das Dualismus besitzen, und ein Teilchen mit Masse und Impuls wird ein charakteristische Wellenlänge besitzen.

$$p = \frac{h}{\lambda}$$

In Festkörperphysik wird statt die Wellenlänge λ der Wellenvektor k benutzt um den Impuls des Elektrons zu beschreiben (Richtung ist wichtig)

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} \quad \vec{p} = \hbar\vec{k}$$

Der Wellenvektor k hängt von der Energie des Elektrons ab.

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

Es ist sehr praktisch Elektronen in Festkörper als Wellen statt als Teilchen zu behandeln. Das hat einige Gründe, weil wir einfacher beschreiben können

- Bewegung und Reflektion der Leitungselektron mit Richtungsabhängigkeit (vgl zu E)
- Erlaubte elektronische Energieniveaus in Abhängigkeit von Gitterstruktur wegen Reflektion usw (Fermionen wechselwirken mit Gitter je nach Wellenlänge)
- Gittervibrationen oder Gitterwellen, Phononen. Das sind quasi-teilchen mit Eigenschaften, die von Quantenteilchen wie Photonen und Elektronen abhängen

Das Bloch-Theorem

Die (Zeit unabhängige) Schrödinger-Gleichung für eines freien Elektrons ist

$$H\psi = E\psi$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{=0} \right] \psi = E\psi$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi = E\psi$$

Die Lösung ist

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

$$\frac{d\psi}{dr} = ik e^{ik \cdot r}$$

$$\frac{d^2\psi}{dr^2} = -k^2 e^{ik \cdot r}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} [-k^2 e^{ik \cdot r}] = E(ik e^{ik \cdot r})$$

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

Bei einem Elektron in einem periodischen Gitter ist $V \neq 0$.

Stopped here last time

Bloch hat 2 Annahmen gemacht

- 1) $V(r)$ von den Ionen hat die Periodizität des Gitters
- 2) Das elektrostatische Potential der anderen Elektronen ist auch periodisch $V(x) = V(x+a)$ (wir betrachten ein Elektron, und nicht das System)

$$\psi(\vec{r}) = u(\vec{k}, \vec{r}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}$$

Die Funktion u_k beschreibt die periodizität des Gitters.

$$\text{bzw } \psi(\vec{r}) = u_k(\vec{r}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}$$

wo k dann ein Indiz ist, das die Modulation an der Amplitude einer elektronischen Wellenfunktion mit Energie $E(k)$ beschreibt.

u_k hat die Periodizität des Gitters und erfüllt die Bedingung

$$u_k(\vec{r}) = u_k(\vec{r} + T)$$

Wo T ein Translationsvektor ist

$$\text{So dass } \psi(\vec{r} + T) = u(\vec{k}, \vec{r}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}$$

Es gibt einige wichtige Konsequenzen des Bloch-Theorems für die elektronischen Energieniveaus

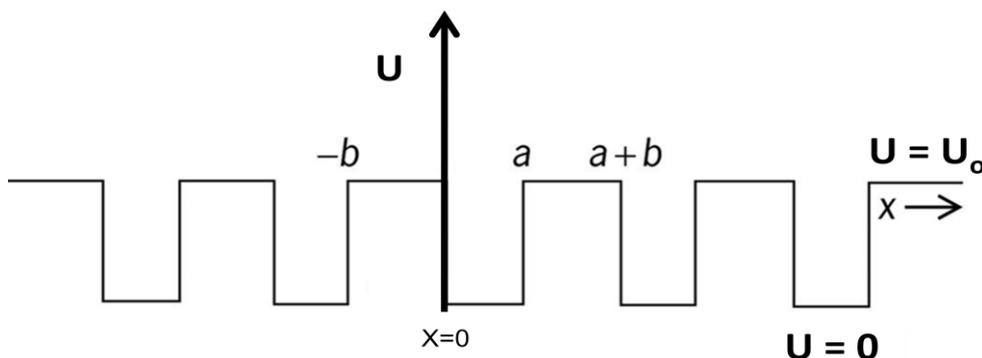
- Sind von k abhängig
- Sind periodisch
- Ergeben erlaubte und verbotene Energieniveaus oder Bänder
- Diese Bänder bzw Energielücken zwischen den Bändern erklären die Unterschiede in Leitfähigkeit für Metalle, Isolatoren, und Halbleiter

Das Kronig-Penney Modell

Das einfache Modell zeigt wie ein periodisches Potential zu Energielücken in den elektronische Energien führen kann.

Ein Elektron bewegt sich durch ein 1D Gitter mit Potentialtöpfen.

- Potential im Topf $U = 0$
- Potentialbarriere $U = U_0$
- Breite des Topfs $= b$
- Raumzwischen Töpfe $= a$



Wir benutzen die Bloch-Wellenfunktion für Elektronen in dem Gitter.

$$\psi(\vec{r}) = u_k(\vec{r}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}$$

wir müssen die Schrödingergleichung in den verschiedenen Bereichen des Gitters lösen.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi'' + U(x) = \psi E$$

$0 < x < a$

$U = 0$ und das Elektron ist "frei"

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi'' = \psi E; E = -\frac{\hbar^2 K^2}{2m}$$

$$\psi = A e^{iKx} + B e^{-iKx}$$

Wo K sind alle k -Werte. Für ein freies Elektron ist das möglich, später werden wir sehen, dass einige k -Werte nicht durchgängig im Gitter erlaubt sind.

Die Konstanten A und B sind durch die Randbedingungen des Gitters bestimmt.

$$-b < x < 0$$

Das Elektron ist nicht mehr "frei" und die Wellenfunktion fällt in der Barriere ab.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' = \psi(E - U_0); E - U_0 = -\frac{\hbar^2 Q^2}{2m}$$

$$\psi = Ce^{Qx} + De^{-Qx}$$

Die Konstanten C und D sind durch die Randbedingungen des Gitters bestimmt.

Die Wellenfunktion muss die Form eine Bloch-Wellenfunktion im ganzen Gitter haben (auch in der Barriere) so

$$\psi(a < x < a + b) = \psi(-b < x < 0)e^{ik(a+b)}$$

Wir lösen jetzt für die Konstanten A , B , C und D so dass ψ und ψ' kontinuierlich im Gitter sind.

Wir schauen die Grenzen $x = 0$ und $x = a$ an.

$$x = 0$$

$$\psi_+ = A + B$$

$$\psi_- = C + D$$

$$\Rightarrow A + B = C + D$$

$$\psi'_+ = iK[A - B]$$

$$\psi'_- = Q[C - D]$$

$$\Rightarrow iK[A - B] = Q[C - D]$$

$$x = a \text{ und } x = -b$$

Die Lösung für ψ bei $x = a$ und $x = -b$ sind gleich.

$$\psi_+ = Ae^{iKa} + Be^{-iKa}$$

$$\psi_- = Ce^{Qb} + De^{-Qb}$$

$$\Rightarrow Ae^{iKa} + Be^{-iKa} = (Ce^{-Qb} + De^{Qb})e^{ik(a+b)}$$

$$\psi'_+ = iKAe^{iKa} - iKBe^{-iKa}$$

$$\psi'_- = Q(Ce^{Qb} - De^{-Qb})e^{ik(a+b)}$$

$$\Rightarrow ikAe^{ika} - ikBe^{-ika} = QCe^{Qb} - QDe^{-Qb}$$

Das Determinant der 4 Koeffizienten für A, B, C, und D muss verschwinden. Nach ein bisschen Arbeit sieht man

$$\left[\frac{Q^2 - K^2}{2QK} \right] \sinh Qb \sin Ka + \cosh Qb \cos Ka = \cos k(a + b)$$

Das ist relativ komplex zu lösen. Um das einfacher zu machen, wir können die Barriere durch eine Delta-Funktion ersetzen, bzw

$$b \rightarrow 0$$

$$U_0, Q \rightarrow \infty$$

Wir definieren P, ein endliche Konstante als

$$P \equiv Q^2 b a / 2$$

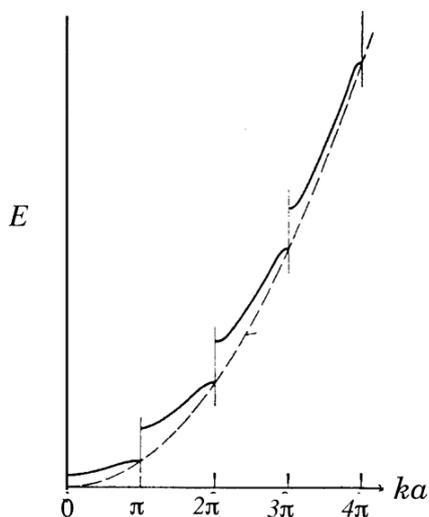
$$[Q \gg K; Qb \ll 1]$$

Die Gleichung ist dann

$$(P / Ka) \sin Ka + \cos Ka = \cos ka$$

Das Ergebnis ist

- **K-Werte sind erlaubte k-Werte (K alle, k- erlaubt)**
- **K = k im Bereich $-\pi/a \leq k \leq \pi/a$**
- **Bei $|k| = \pi/a$ gibt es ein Diskontinuität**



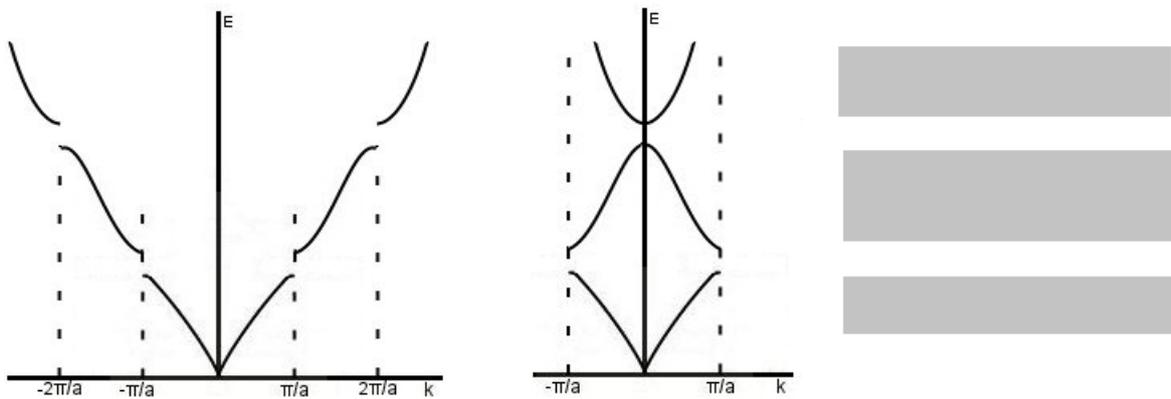
Die E vs k Werte sind bekannt als die „Dispersionsrelation“ des Elektrons. Das sind die erlaubte k -Werte und entsprechende Energiewerte eines Elektrons im periodischen Gitter.

Was wir sehen, ist dass die Dispersionsrelation periodisch ist, und dass alle Information innerhalb

$$-\pi/a \leq k \leq \pi/a$$

enthalten ist (Brillouin Zone). Hier ist „ a “ die Gitterkonstante – die Entfernung zwischen Gitterionen.

Das ist ein wichtiges Ergebnis der Festkörperphysik. Es bedeutet, dass alle relevante physikalische Information innerhalb eine „Zone“ ist. Wir können jetzt die Dispersionsrelation in der reduzierten Schema zeigen (und Energiebänder)



Was passiert bei $k = \pi/a$?

Elektronen mit $k < \pi/a$ können sich durch das Gitter bewegen, und merken die Gitterionen nur durch u_k (die Modulation des Potentials). Die Beschreibung der Elektron ist gleich in jeder Zone.

Elektronen mit $k = \pi/a$ werden Bragg reflektiert

Elektronen mit $k > \pi/a$ haben kein periodisches Verhalten, und die Welle wird schnell attenuiert

Metalle, Isolatoren und Halbleiter

Wir können das Modell der „Energiebänder“ benutzen, um den Unterschied zwischen der elektronische Eigenschaften Metalle, Isolatoren und Halbleiter zu erklären.

Metalle – die Energiebänder sind nichtvollständig mit Elektronen besetzt. Elektronen können ohne zusätzliche Energie zwischen Energiezustände innerhalb der Bänder sich bewegen.

Leitungselektronen.

Isolatoren – die Energiebänder sind komplett besetzt. Elektronen in einem Band können nicht zu einem unbesetzten Energieniveau sich bewegen.

Halbleiter – die Energiebänder sind komplett besetzt (wie beim Isolator). Aber die Energielücke zwischen Bänder ist nicht so groß, und Elektronen in einem Band können mit zusätzlicher Energie (zB Licht) von einem Band ins nächst höhere.

***k*-Raum und Zustandsdichte**

Es ist praktisch die Eigenschaften von Elektronen im *k*-Raum zu beschreiben. Wir wollen die elektronischen Zustände im *k*-Raum anschauen, und die elektronische *Zustandsdichte* bestimmen. Nützlich um die Eigenschaften von Halbleiter (Leitungselektronen, Löcher) zu beschreiben.

Die Unschärferelation sagt

$$\Delta p \Delta x \geq 2\pi\hbar$$

Die Elektronen sind als Wellen über das Gitter delokalisiert – der genauere Ort des Elektrons ist nicht bekannt, dafür ist der Impuls sehr definiert

Der Impuls ist

$$\vec{p} = \hbar \vec{k}$$

So können wir den Impuls genau bestimmen, und betrachten die Elektronen im Impuls, oder *k*-Raum. Wir wissen dann auch die Energie des Elektrons

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

Wir wollen jetzt die elektronischen Zustandsdichten in einem Energieband bestimmen. Dafür müssen wir wissen das „Volume“, das ein Elektron einnehmen kann. Das Volumen des *Phasenraums* beschreibt der Ort und Impuls eines individuellen Teilchens nach der Unschärferelation

$$1D \quad \Delta p \Delta x = 2\pi\hbar$$

$$2D \quad \Delta p_x \Delta x \Delta p_y \Delta y = (2\pi\hbar)^2$$

$$3D \quad \Delta p_x \Delta x \Delta p_y \Delta y \Delta p_z \Delta z = (2\pi\hbar)^3$$

Im Phasenraum hat ein Energiezustand ein Volumeneinheit von

$$(2\pi)^D$$

Und in *k*-Raum

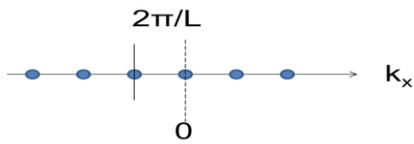
$$(2\pi)^D / V$$

Wo *V* = volumen im Ortsraum.

Wegen des Pauli Prinzips (ein Elektron/Quantenzustand) gibt es 2 Elektronen pro Phasenraumeinheit (2 Spinzustände). Die elektronische Zustandsdichte = 2 spinzustände/(*k*-Einheitvolumen)*Vol *dk*

$$g(k) = 2 \frac{V_{k\text{-raum}}}{V_{\text{einh}k}}$$

Zustandsdichte 1D



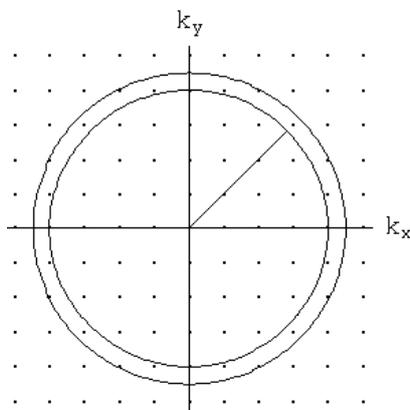
Wir betrachten eine Linie von $x = 0$ bis $x = L$. Zwischen k Werte sind $2\pi/L$.

Die Zustandsdichte ist (Zustand/Volume = 2 spins \times 1/vol einh. *Vol k-raum)

$$g(k) = 2 \frac{L}{2\pi} \int_0^L k dk = \frac{1}{\pi}$$

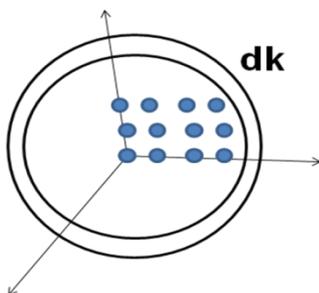
Zustandsdichte 2D

Wir betrachten einen Kreis mit Radius k



$$g(k)dk = 2 \frac{L^2}{(2\pi)^2} 2\pi k dk = \frac{L^2}{\pi} k dk$$

Zustandsdichte 3D



$$g(k)dk = 2 \frac{L^3}{(2\pi)^3} 4\pi k^2 dk = \frac{L^3}{\pi^2} k^2 dk$$

Man kann auch $g(k)dk$ als $g(E)dE$ umformulieren, um die Dichte der Energiezustände zu bekommen.

$$\frac{2m}{\hbar^2} dE = dk$$

Halbleiter

Halbleiter zeigen einige interessante Eigenschaften im Vergleich zu Metallen.

- Leitfähigkeit nimmt mit Temperatur zu (wieso?)
- Das Fermi-niveau ändert sich mit Temperatur, Defekte, Lichtabsorption. Wir unterscheiden deshalb in HL zwischen Fermienergie ($T = 0K$) und Fermi-niveau ($T \neq 0K$). In Metalle sind Änderungen in der energetischen Verteilung der Elektronen kaum bemerkbar, weil so viele elektronische Zustände zur Verfügung stehen. In HL müssen freie Ladungsträger mit $E > E_g$ angeregt, so dass die Systemenergie sich stark verändert.

Die Dispersionsrelation von Elektronen in Halbleiter sind abhängig von

- Valenzelektronen (schaut nach)
- Kristallstruktur (besprechen wir später)

Slide E vs k für Si, Ge

- Valenzband – höchst energetisch gefülltes Energieband
- Leitungsband – tiefst energetisches ungefülltes Energieband
- Energielücke – Energiedifferenz zwischen Valenz und Leitungsband
- Direktband – Max E_v direkt (im k-raum) unter Min E_c
- Indirektband – Max E_v verschoben im k-Raum von Min E_c . Absorbtionseigenschaften

Ladungsträger in Halbleiter - Elektronen und Löcher

In Metalle sind Elektronen für elektrische (und wärme) Leitfähigkeit zuständig. In Halbleiter gibt es dazu „Löcher“.

Löcher sind Quasi-Teilchen. Wenn ein Elektron von Valenzband ins Leitungsband angeregt wird bleibt ein „Loch“ ins Valenzband zurück. In dem meist gefüllten Valenzband wirkt das Loch wie ein positiv geladenes Teilchen. Die Löcher kann man als Teilchen mit +ver Ladung, Masse, Geschwindigkeit, Energie, und alle anderen Eigenschaften die Elektronen besitzen beschreiben.

Ein Unterschied – Elektronen relaxieren in Energie (von hoher zu niedriger Energie) und Löcher schweben (von niedriger Energie zu hoher) in einer Verteilung.

Detailliertes Gleichgewicht

In Halbleiter ändert sich das System stark, wenn ein Elektron vom Valenz ins Leitungsband angeregt wird.

Das Konzept *Detailed balance* beschreibt den Übergang vom Gleichgewicht zum Quasi-Gleichgewicht wegen Photon Emission/Absorption, Änderungen in Dichte von Ladungsträger, Phononen (später). Die Energie/Dichte der Teilchen im System ändert sich, um wieder Gleichgewicht herzustellen.

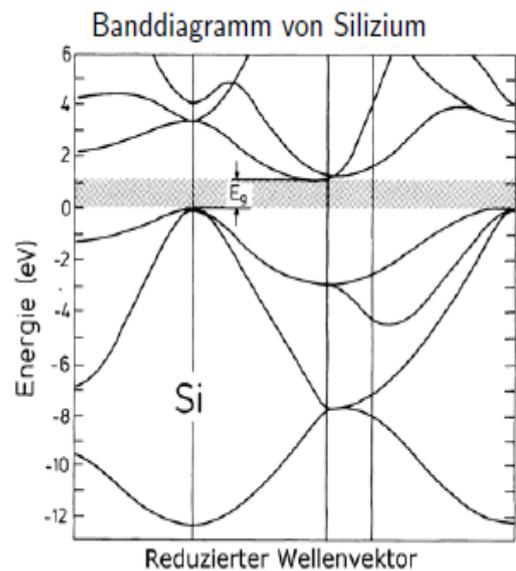
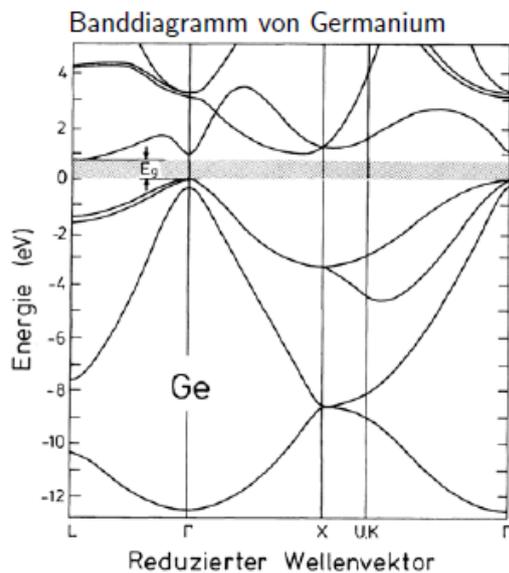
Einige Konzepte

- n = density of conduction band electrons (in equilibrium)
- n_- = total density of conduction band electrons (not necessarily in equilibrium)

- $p =$ density of valence band holes (in equilibrium)
- $p_- =$ total density of valence band holes (not necessarily in equilibrium)
- E_F und $\mu =$ Fermi level, also the chemical potential. Its position is sensitive to changes in particle number

Die effektive Masse

Wenn man die elektrischen Eigenschaften von Halbleiter beschreibt, ist es unpraktisch die komplexe Dispersionsrelation direkt immer zu betrachten. Das wird über die „effektive Masse“ der Ladungsträger gemacht.



Die effektive Masse beschreibt die Bewegung eines Elektrons im Gitter im elektrischen Feld. Die Kraft ist

$$F = -eE = ma = m \frac{dv}{dt} = \frac{dp}{dt} = \hbar \frac{dk}{dt}$$

Wir interessieren uns für m , die von k abhängt.

Wir lösen erst für a .

$$a = dv / dt$$

Die Gruppengeschwindigkeit der Elektronenwellenpaket ist

$$v_g = \frac{1}{\hbar} \frac{d\varepsilon}{dk}$$

So

$$a = \frac{dv}{dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{d}{dt} \left(\frac{d\varepsilon}{dk} \right)$$

Für kleine Änderungen in Energie mit Zeit

$$\frac{d\varepsilon}{dt} = \frac{d\varepsilon}{dk} \frac{dk}{dt} = \frac{-eE}{\hbar} \frac{d\varepsilon}{dk} = -eE v_g$$

So

$$a = \frac{1}{\hbar} \left(\frac{-eE}{\hbar} \frac{d\varepsilon}{dk} \right) \frac{d\varepsilon}{dk}$$

$$a = \frac{-eE}{\hbar^2} \frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial^2 k}$$

$$a = \frac{1}{m} (F_x + F_y + F_z) = F / m^*$$

m^* , die effektive Masse ist ein Tensor, der die E vs k Relation beinhaltet

$$m^* = \hbar^2 \left(\frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial^2 k} \right)^{-1} = \hbar^2 \begin{pmatrix} m_{xx} & m_{xy} & m_{xz} \\ m_{yx} & m_{yy} & m_{yz} \\ m_{zx} & m_{zy} & m_{zz} \end{pmatrix}$$

Die Symmetrie des Gitters bestimmt die Off-Diagonale Elemente. Für einfache, symmetrische Gitter ist m^* ein Skalar.

$$m^* = \hbar^2 \left(\frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial^2 k} \right)^{-1}$$

Die Energiewerte um die Max und Min der E_v und E_c sind für die Absorption und Emission von Licht, so wie die Bewegung von Ladungsträger. Die elektronischen Energiebänder (E vs k) sind annähernd parabolisch in diesem Bereich

$$E_v = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m_h^*} \quad E_c = E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e^*}$$

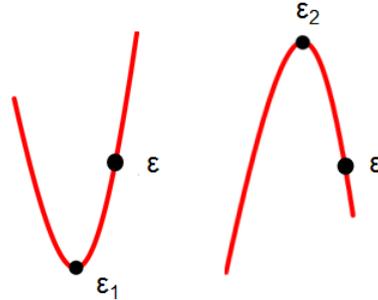
Die obere Energiewerte in E_v sind der Nullpunkt $E = 0$. M^* ist die effektive Masse der Ladungsträger.

Negative m^* und Löcher im Valenzband

Die effektive Masse von Löchern ist negativ, weil die Krümmung E vs k auch negativ sein kann.

In der Nähe von E_v max und E_c min haben wir die folgende Situation, und berücksichtigen die Elektronen (noch keine Löcher)

$$\varepsilon \approx \varepsilon_1 + \frac{\hbar^2}{2m_1} (k - k_1)^2$$



$\varepsilon > \varepsilon_1$ (Leitungsband min)

$$\frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial k^2} > 0; m^* > 0$$

$$\varepsilon \approx \varepsilon_1 + \frac{\hbar^2}{2m_1} (k - k_1)^2$$

+ve m^* . Elektronen relaxieren in Energie.

$\varepsilon < \varepsilon_2$ (Valenzband max)

$$\frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial k^2} < 0; m^* < 0$$

$$\varepsilon \approx \varepsilon_1 - \frac{\hbar^2}{2m_1} (k - k_1)^2$$

-ve m^* . In diesem Fall wird ein Elektron sich bewegen, als ob es eine negative Masse hätte (unbesetzte Zustände sind höher in Energie), bzw unbesetzte Zustände bewegen sich als ob die +ve Ladung und +ve Masse haben.

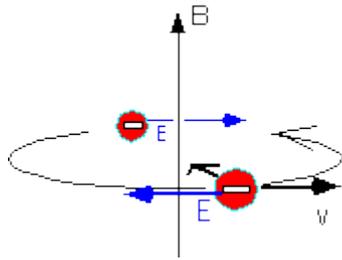
$$ma = -eE$$

$$-ma = -eE$$

$$ma = eE$$

Zyclotronresonanz

Ein elektron im B-Feld rotiert im Orbital senkrecht zum B nach der Lorenz-Kraft



$$F = -e[v \times B] = r\omega_c eB$$

wo ω_c = Zyklotronfrequenz (1/Zeit für eine Umdrehung).

Die Zentrifugalkraft = Lorentzkraft

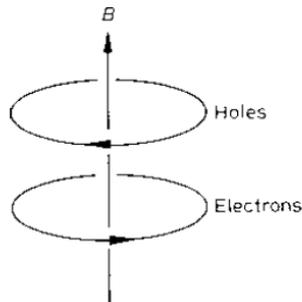
$$F = m^* \omega_c^2 r$$

$$m^* \omega_c^2 r = \omega_c r e B$$

$$\omega_c = eB / m^*$$

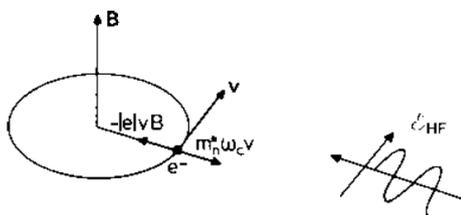
wo m = Masse eines Elektrons. Im Vakuum, ist $m = 9.11 \times 10^{-31}$ kg.

In einem Festkörper, kann die Methode benutzt werden, um m^* für Elektronen und Löcher zu bestimmen.



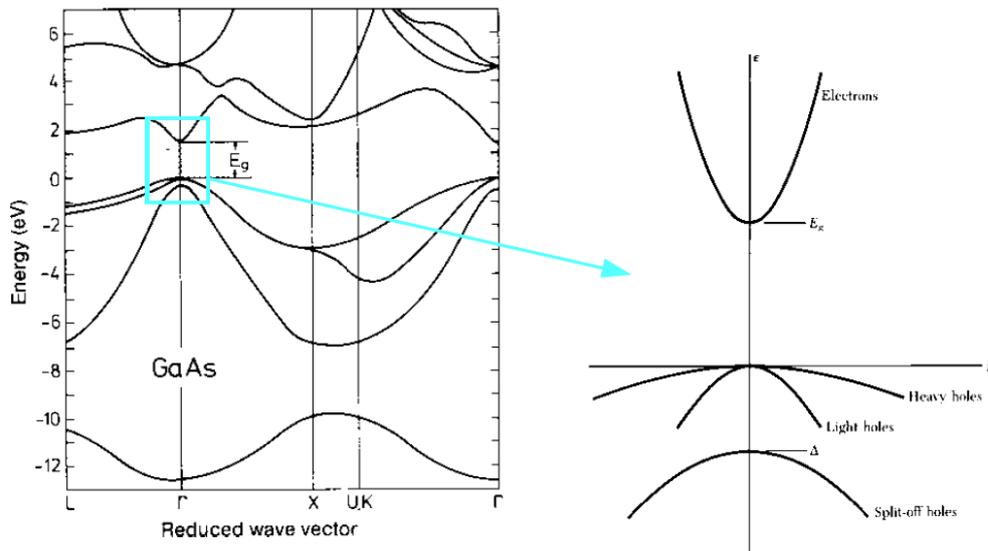
Für die Messung muss man ω_c experimentell bestimmen, um m^* zu bekommen.

Man bestimmt ω_c über die Resonanzabsorption der Elektronen von Hochfrequenz E-Feld mit $f = 2\pi\omega_c$



Bei einem konstanten B-Feld wird das E-Feld variiert bis Resonanzabsorption der Elektronen stattfindet (at $\omega = \omega_c$).

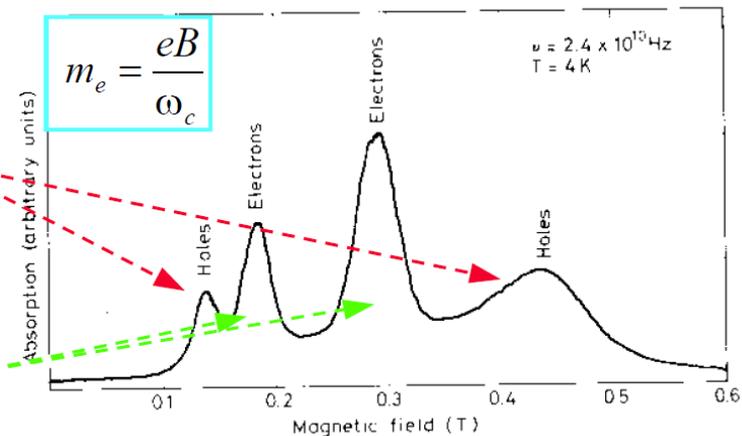
Elektronen in der Nähe von den Bandkanten werden gemessen. Es gibt, wegen der komplexen Dispersionsrelationen in Halbleiter leichte und schwere Löcher (im Prinzip auch Elektronen, aber wir schauen solche hohe Energien nicht an).



Absorption of RF field gives m_e and m_h .

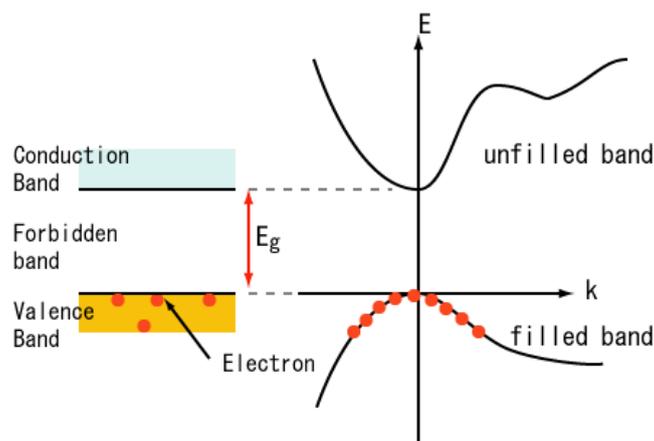
Light & heavy holes due to curvature of VBs

m_e depends on direction different electron peaks due to m_T and m_L



Energiediagramme in Halbleiter

Da die E vs k Information in m^* enthalten ist, ist es möglich ein vereinfachtes Schema der Energiediagramm anzuwenden.



Elektronen im E_c und Löcher in E_v

Wenn wir über Elektronen und Löcher in Halbleiter reden interessieren wir uns primär für

- Leitungselektronen (Elektronen im Leitungsband, die freibeweglich sind)
- Löcher im Valenzband (sind immer frei beweglich wegen der hohen Elektronendichte im Valenzband)

Diese Ladungsträger können wir als „frei“ behandeln.

Wir wollen jetzt die Dichte von Elektronen und Löchern in den Energiebänder eines Halbleiters berechnen. Wir berücksichtigen Ladungsträger in der Nähe von $E_{c \text{ min}}$ und $E_{v \text{ max}}$, wo k vs E konstant ist.

Wir wissen $g(k)$ vom letzten Mal, dass die Zustandsdichte in 3D

$$g(k)dk = 2 \frac{L^3}{(2\pi)^3} 4\pi k^2 dk = \frac{L^3}{\pi^2} k^2 dk$$

und jetzt für Energie

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

$$dk = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\hbar^2}{2mE}} \frac{2m}{\hbar^2} dE = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2 E}} dE$$

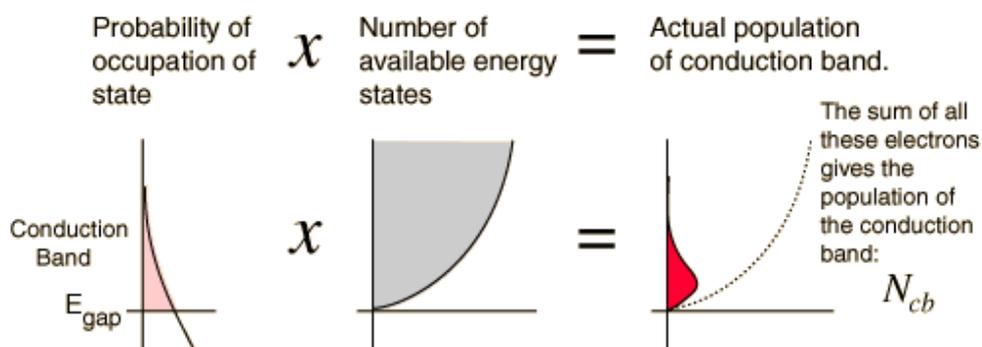
$$g(E)dE = \frac{L^3}{2\pi^2} \left(\frac{2mE}{\hbar^2} \right) \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2 E}} dE$$

$$g(E) = \frac{L^3}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{E} dE$$

oder, im Volumen vom Material, schreibt man

$$g(E) = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{E} dE$$

Die Elektronendichte im Leitungsband ($E = E_c - \infty$)



$$n = \frac{N}{V} = \int_{E_c}^{\infty} g(E) f(E) dE$$

Das bedeutet, die Elektronen sind in den erlaubten Energieniveaus (mit Dichte $g(E)$) nach der Fermi-Dirac Verteilung verteilt.

In einem Metall ist $E_F @ T \neq 0 \sim E_F @ T = 0$, weil so viele unbesetzte Energieniveaus energetisch „dicht“ sind. In einem Halbleiter aber sind die für die elektrische Leitfähigkeit relevante elektronische Niveaus durch $E = E_g$ getrennt. Das bedeutet, dass eine Änderung in der Leitungselektronendichte mit relative große Änderungen im Gesamtsystemenergie verbunden ist.

Das bedeutet, dass für die Fermi-Dirac Verteilung, wir unterscheiden zwischen E_F und μ

$$E_F = E_F @ T = 0K$$

$$E_F = \mu @ T \neq 0K$$

$$f(E)_{FD} = \frac{1}{\exp(E - \mu / kT) + 1}$$

Bei $T = 0K$ gibt es keine Elektronen im Leitungsband. Die elektronische Energie des Systems hängt nur von der Dichte der Elektronen im Valenzband ab.

Bei $T \neq 0K$, einige Elektronen sind thermisch zu höheren Energieniveaus angeregt, und die nächsten freien elektronische Zustände sind im Leitungsband.

μ - Chemisches Potential. Von der freien Energie des Systems, Änderung in Teilchenzahl dN führt zu Änderungen im chemischen Energie

$$dF = -SdT - pdV + \mu dN...$$

Für Elektronen im Leitungsband

$$g(E) = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{E - E_c} dE$$

$$n = \frac{N}{V} = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \int_{E_c}^{\infty} \frac{\sqrt{E - E_c} dE}{1 + \exp\left(\frac{E - \mu}{kT}\right)}$$

$$n \approx \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \int_{E_c}^{\infty} \exp\left(-\frac{E - \mu}{kT}\right) \sqrt{E - E_c} dE$$

Das ist in der Form von bekannten Integralen, so (Note 2; kT in Konstante)

$$n = 2 \left(\frac{2mkT}{\hbar^2} \right)^{3/2} \exp\left(\frac{\mu - E_c}{kT}\right) = N_c \exp\left(\frac{\mu - E_c}{kT}\right)$$

Und für Löcher ($E = 0$ ist die obere Kante des Evs)

$$g(E) = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{E_v - E} dE$$

$$f(E)_{FD} = 1 - \frac{1}{\exp(E - \mu / kT) + 1}$$

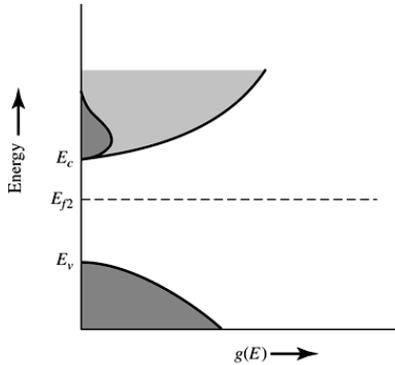
So

$$p = 2 \left(\frac{2mkT}{\hbar^2} \right)^{3/2} \exp\left(\frac{E_v - \mu}{kT}\right) = N_v \exp\left(\frac{E_v - \mu}{kT}\right)$$

N_c und N_v sind die „Effektive Zustandsdichten“ im Leitungs- und Valenzband.

$$n = 2 \left(\frac{2mkT}{\hbar^2} \right)^{3/2} \exp\left(\frac{\mu - E_c}{kT}\right) = N_c \exp\left(\frac{\mu - E_c}{kT}\right)$$

$$p = 2 \left(\frac{2mkT}{\hbar^2} \right)^{3/2} \exp\left(\frac{E_v - \mu}{kT}\right) = N_v \exp\left(\frac{E_v - \mu}{kT}\right)$$



Die Dichten der Elektronen und Löcher sind im „intrinsischen“ (nicht dotierten) Halbleiter gleich

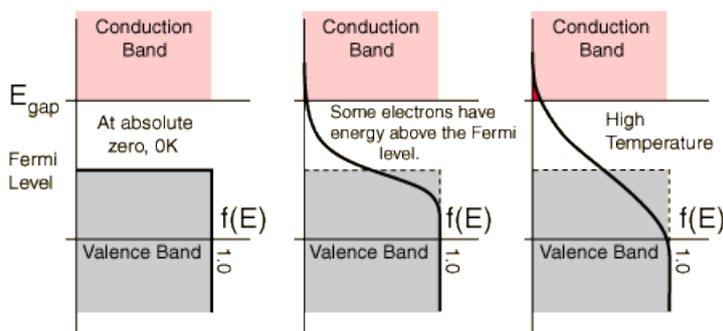
$$n_i = p_i = \sqrt{N_c N_v} \exp(E_c - E_v) = \sqrt{N_c N_v} \exp\left(-\frac{E_g}{kT}\right)$$

Wir können diese Wert für n und p in den oberen Gleichungen setzen und finden

$$m_e^* \exp\left(\frac{\mu - E_c}{kT}\right) = m_h^* \exp\left(\frac{E_v - \mu}{kT}\right)$$

$$\mu = \frac{E_g}{2} + \frac{3}{4} kT \ln(m_h / m_e)$$

Für $m^*_h = m^*_e$ μ ist in der Mitte der Bandlücke



No electrons can be above the valence band at 0K, since none have energy above the Fermi level and there are no available energy states in the band gap.

At high temperatures, some electrons can reach the conduction band and contribute to electric current.

Dotierung in Halbleitern

Zusätzliche Ladungsträger in Halbleiter ($n \neq p$) :

- Gitterdefekte
- Unreinheit
- Fremde Atome

Fremde Atome können absichtlich im Gitter eingebaut, um Elektron oder Löcherdichte zu erhöhen.

Donator – Elektron abgeben (n-typ)

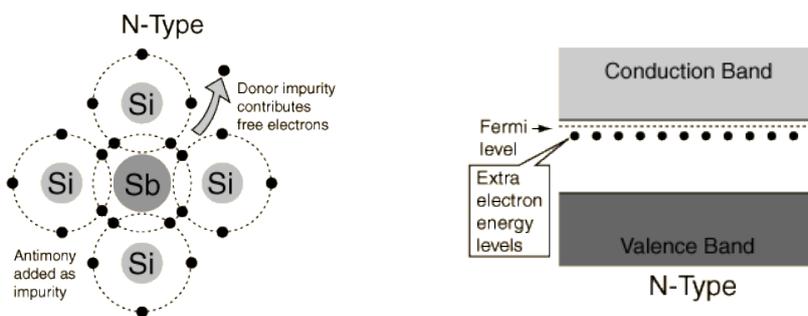
Akzeptor – Elektron akzeptieren (p-typ)

Ob ein Fremdatom ein Donor oder Akzeptor ist, hängt vom Halbleiter ab. Si hat 4 Valenzelektronen um Bindungen mit benachbarten Atome zu bilden.

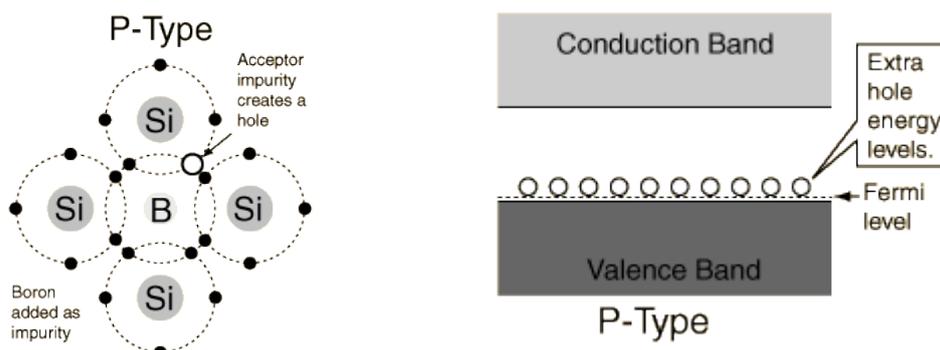
5 B Boron 2,34	6 C Carbon 2,62	7 N Nitrogen 1,251
13 Al Aluminum 2,70	14 Si Silicon 2,33	15 P Phosphorus 1,82
31 Ga Gallium 5,91	32 Ge Germanium 5,32	33 As Arsenic 5,72

©2005 HowardWark

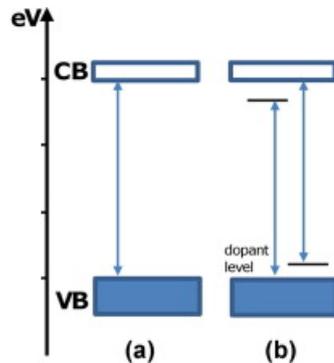
Man kann ein Si-Kristall mit P, As, Sb dotieren (5 Valenzelektronen). Ein ungebundenes Elektron/Fremdatom wird im Gitter abgegeben (n-Dotierung). Das Elektron ist im Leitungsband, und weil die Elektronenverteilung im System sich ändert, bewegt sich das Fermi-niveau energetisch nach oben – Richtung E_c Kante.



Wenn man das Si-Kristalla mit Al, Ga, Br (3 Valenzelektronen) wird ein Loch im Valenzband erzeugt.



Fremdatome machen neue elektronische Zustände in der Bandlücke. Man unterscheidet zwischen „flache“ Störstellen und „tiefe“ Störstellen. Bei kontrollierter Dotierung sind es flache Störstellen, die bei Raumtemperatur ionisiert sind.



Die Dotiereffizienz (ionisierte Fremdatome/Alle Fremdatome) kann durch das Modell des H-Atoms bestimmt werden.

Im Vakuum ist die Energie, um ein Elektron vom Grundzustand zum n-Niveau anzuregen

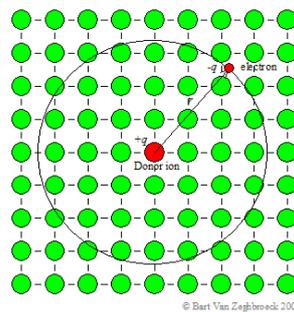
$$E_n = -\frac{me^4}{8\epsilon_0^2 h^2 n^2}$$

Und die Ionisationsenergie ist 13.6 eV.

Für ein Fremdatom im Halbleiter ist die Ionisationsenergie

$$\epsilon_c - \epsilon_d = 13.6 \frac{m^*}{m\epsilon_0^2 \epsilon_r^2}$$

Wo m^* = effektive Masse, ϵ_r = Dielektrische Konstante des Halbleiters (Si ~ 12). Nach Ionisation ist das Elektron/Loch vom Ion durch r getrennt. r hängt vom ϵ_r ab.



Wegen dem Quasi-Gleichgewicht im Halbleiter, ist die Gesamtladung durch die Dotieratome bestimmt.

$$n \sim N_D^+ \sim N_D$$

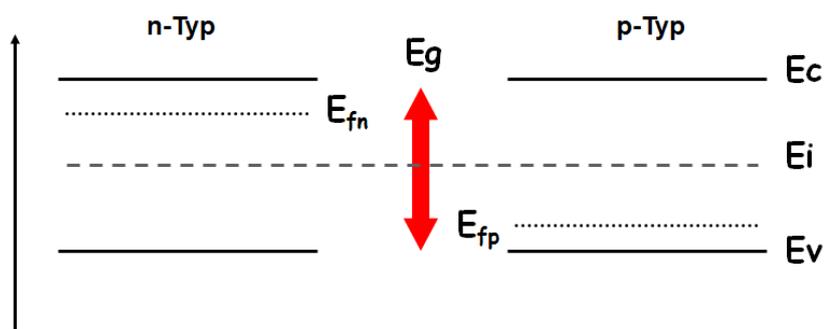
$$p \sim N_A^- \sim N_A$$

Tiefe Störstellen werden unbeabsichtigt im Gitter eingebaut, und verursachen elektronische Zustände tief in der Bandlücke. Ladungsträger werden von solchen Störstellen gefangen, und die Leitfähigkeit des Halbleiters beeinträchtigt.

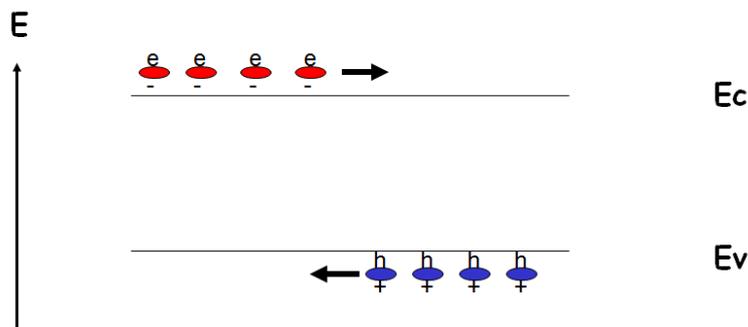
Der pn-Übergang

Ein Übergang zwischen p und n dotierten Halbleiter ist eine sehr interessante Struktur. Wenn man ein n-Typ mit p-typ kontaktiert, fließen Elektronen vom Elektronreichen zu Elektronenarmen Bereich (ausgleich der Ferminiveaus zwischen Materialien).

Befor der Kontaktierung

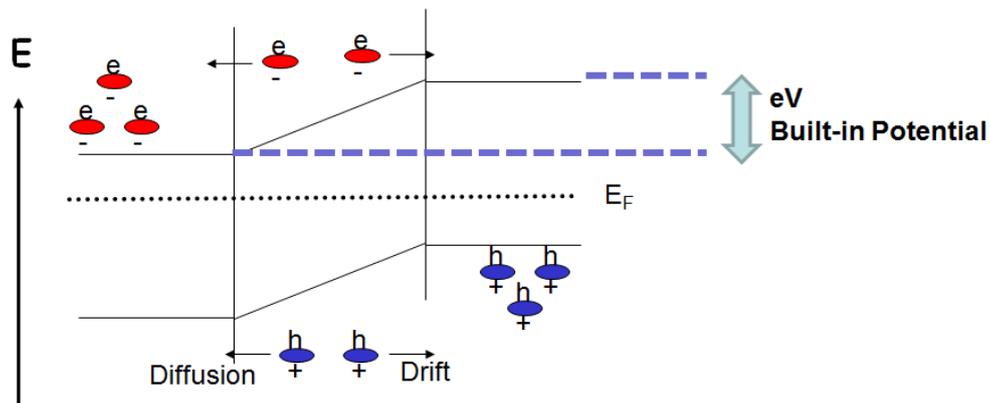


Direkt nach der Kontaktierung



Zwischen p und n Bereich "rekombinieren" die Ladungsträger. Die Elektronen relaxieren zum Valenzband, und der Bereich ist die „Verarmungszone“. Das führt dazu, dass das System zum Gleichgewicht kommt.

After contact (in equilibrium)



Wichtige Punkte über den pn-Übergang

- EF ist konstant über den ganzen Übergang (ein System von Elektronen, f(E) hat keine Sprünge)
- Führt zu „Bandbiegung“ im Bezug zu Evakuum
- Es gibt ein Potential zwischen p und n-Bereich, dass durch die Differenz in Energie zwischen Ecn und Ecp (oder auch Evn und Ecn) bestimmt ist
- Elektronen im n-Bereich müssen eine Energiebarriere überwinden, um zum p-Bereich zu fließen (umgekehrt so auch für die Löcher) – kein Stromfluss im Gleichgewicht

Der Strom über den pn-Übergang besteht aus Diffusion (von großer Konz. zu kleiner Konz.) und Driftströme

$$j^{diff} = e(D_n \frac{\partial n}{\partial x} - D_p \frac{\partial p}{\partial x}) \quad j^{drift} = e(n\mu_n + p\mu_p)E_x$$

D - Diffusionskoeffizient

Im Gleichgewicht ist der Gesamtstrom über den Übergang null. Die Beiträge gleichen sich aus, bei Diffusion bildet sich ein Feld, und umgekehrt, so dass kein Strom fließt.

Wir kennen den Driftstrom von metallischer Leitfähigkeit schon. Diffusion ist was besonders für Halbleiter.

Die Einsteinrelation gibt das Verhältnis zwischen D und μ .

$$D_n = \frac{k_B T}{e} \mu_n$$

$$D_p = \frac{k_B T}{e} \mu_p$$

Halbleiter in Quasi-Gleichgewicht

Was passiert, wenn eine Spannung angelegt wird oder der Halbleiter beleuchtet wird?

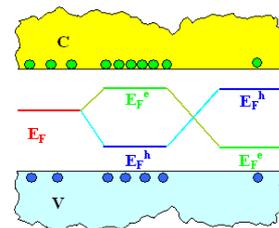
Thermalisierung passiert auf kurzen Zeitskalen (fs) – das ist die Relaxion von Ladungsträger in Energiebänder.

Rekombination (Relaxation zwischen Energiebänder) passiert auf langen Zeitskalen (ms).

Die Änderung in n und p sind dann

$$n = n_o + \delta n = n_i \exp\left(\frac{E_{Fn} - E_{Fi}}{kT}\right)$$

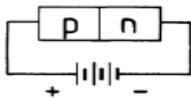
$$p = p_o + \delta p = n_i \exp\left(\frac{E_{Fi} - E_{Fp}}{kT}\right)$$



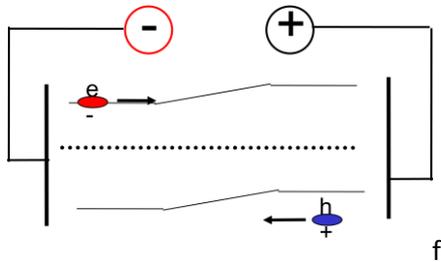
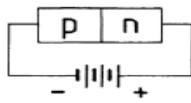
Wo E_{Fn} und E_{Fp} sind die Quasi-Ferminiveaus..

PN-Dioden

Durchlaßrichtung

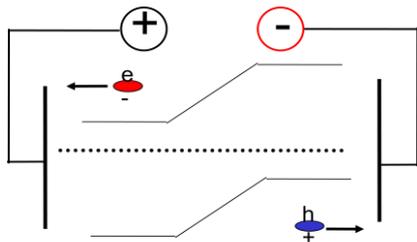


Sperrichtung

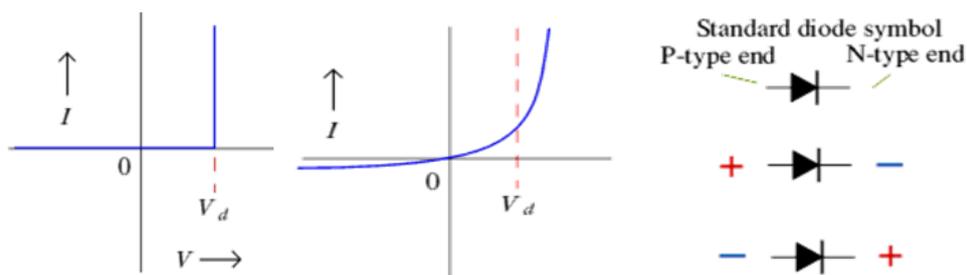


$$I(U) = (I_n^{\text{gen}} + I_p^{\text{gen}}) \left(e^{\frac{eU}{k_B T}} - 1 \right)$$

Sperrichtung

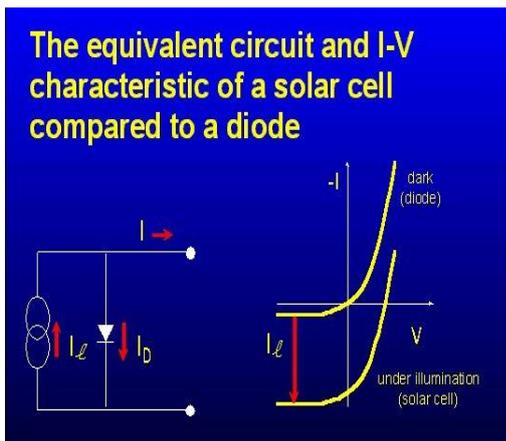
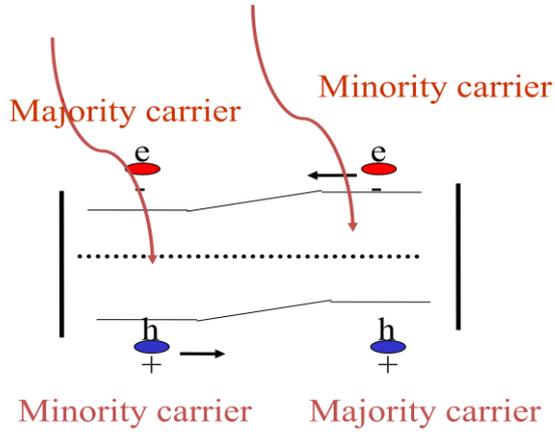


Mit einer angelegten Spannung spalten die „Quasi-Ferminiveaus“ der Elektron und Löcher auf (nicht mehr im Gleichgewichtszustand).

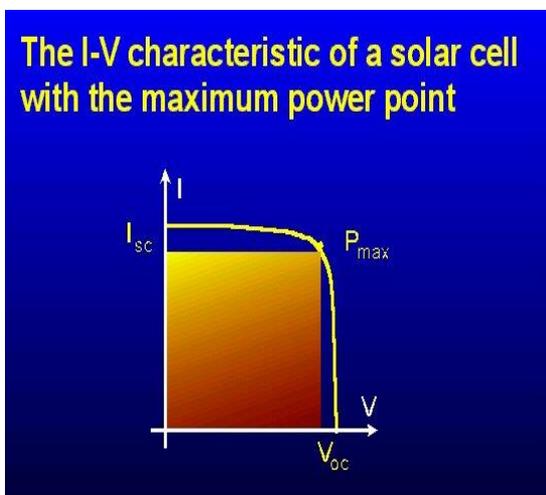


PN-Solarzelle

- Pn-Diode unter beleuchtung
- Ladungsträger – Diffusionstransport von „Minoritätsträger“
- Licht wird absorbiert, Elektronen im p diffundieren zum n-Bereich und umgekehrt



$$I = I_o \left(e^{\frac{qV}{nkT}} - 1 \right) - I_L$$



Kristallstruktur

Bis jetzt haben wir den Einfluss der Kristallstruktur nicht explizit berücksichtigt. Kristallsymmetrie bestimmt viele wichtige Eigenschaften

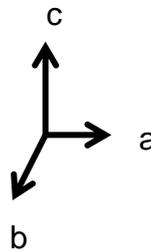
- Elektrische und thermische Leitfähigkeit
- Magnetismus

Wegen der Periodizität des Gitters müssen wir nur die „Einheitszell“ bestimmen. Die Einheitszelle ist die kleinste Zelle im Gitter, die die Symmetrieinfo beinhaltet.

Gittersymmetrie

Perfekte Kristalle zeigen *Translationsinvarianz*. Wir ignorieren erstmal die Atome im Gitter und berücksichtigen nur regelmässige Punkte im Raum. Es ist möglich alle Punkte mit einem Verschiebungsvektor (\mathbf{T}) zu verbinden:

$$(1) \quad \mathbf{T} = n_1 \vec{a} + n_2 \vec{b} + n_3 \vec{c}$$



\mathbf{a} , \mathbf{b} und \mathbf{c} sind Einheitsvektoren (mit entsprechenden Winkeln) und n_1 , n_2 and n_3 sind ganze Zahlen.

Der Satz \mathbf{T} verbindet Punkte im Gitter mit gleicher Umgebung (zB \mathbf{r} and \mathbf{r}')

$$(2) \quad \mathbf{T} + \vec{r} = \vec{r}'$$

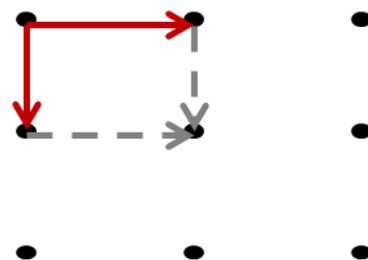
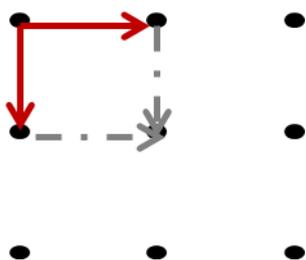
Gitter die Gleichung (1) und (2) erfüllen sind *Bravais Gitter*. Ein Bravais-Gitter ist eine unendliche Anordnung von Punkten und alle diese Punkte sind äquivalent in dem Sinne, dass von jedem Punkt aus gesehen diese Anordnung vollkommen identisch aussieht

- 2D – 5 Bravais Gitter
- 3D – 14 Bravais Gitter

2D Bravais Gitter

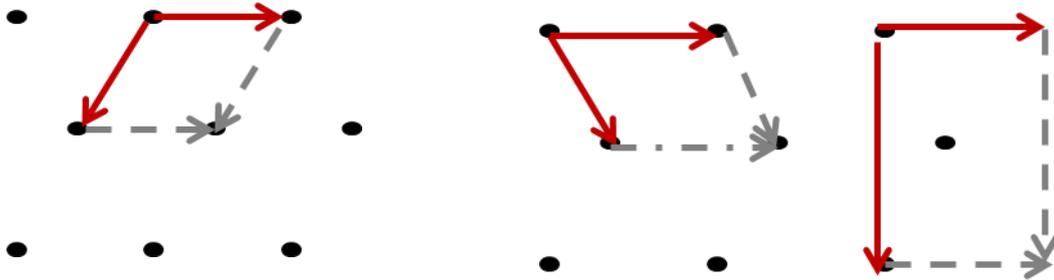
a) $|a|=|b|$; $\varphi = 90^\circ$ (Quadratisch)

b) $|a| \neq |b|$; $\varphi = 90^\circ$ (Rechteckig)



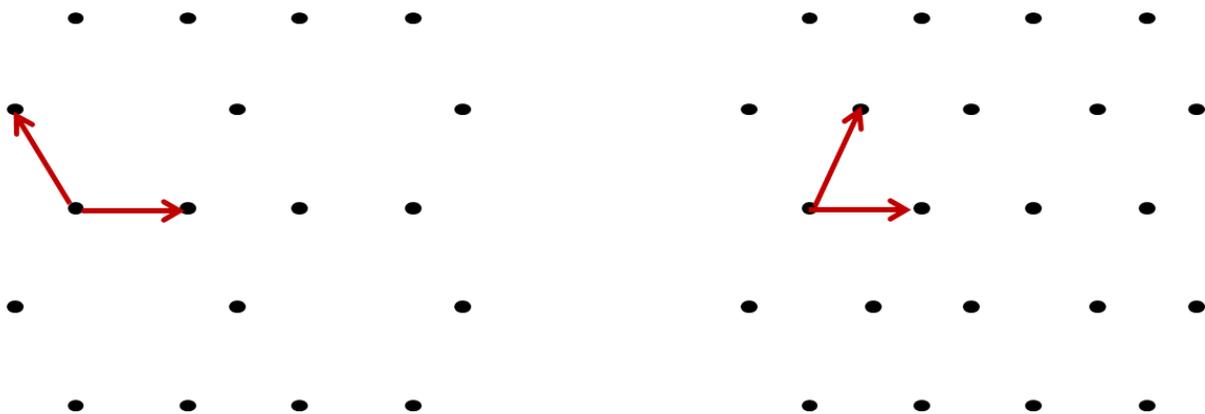
c) $|a|=|b|$; $\varphi = 120^\circ$ (Hexagonal)

d) $|a| \neq |b|$; $\varphi = 90^\circ$ (Zentriertes Rechteck)



Für d) das zentrierte Rechteck ist ein Einheitszelle aber nicht die primitive Zelle (kleinstes Volume). Die Einheitszelle beinhaltet die ganze Information des Gitters. Es gibt Fälle wo es praktischer ist ein Einheitszelle zu wählen die nicht die primitive Zelle ist.

Beispiel: Welches ist ein Bravais Gitter? (Wabenstruktur vs zentrierte Wabenstruktur)



Die zentrierte Wabenstruktur ist ein Bravais Gitter – man kann das Gitter mit Gleichung (1) und (2) rekonstruieren. Mit der Wabenstruktur ist das nicht möglich. Beispiel für ein Wabengitter – Graphen.

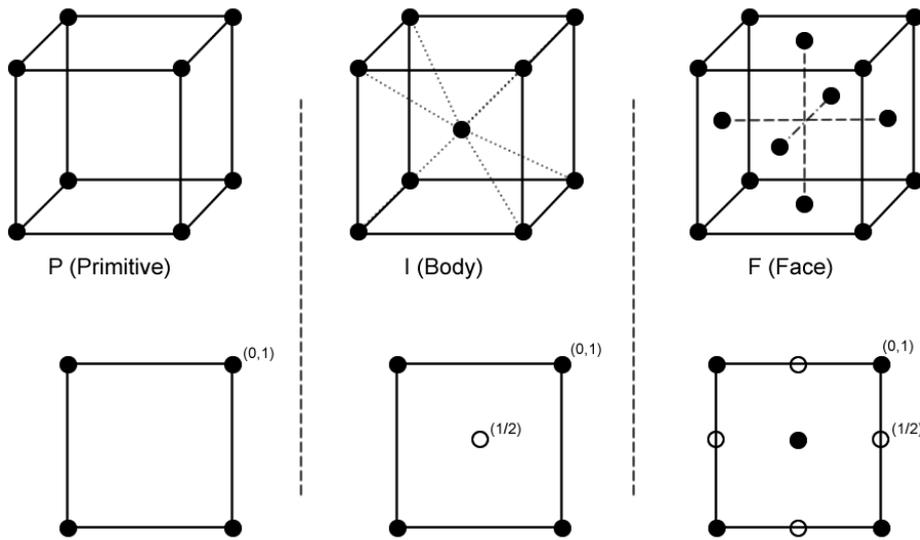
3D Bravais Gitter

In 3D gibt es viel mehr Symmetrioperationen als in 2D. Symmetrioperationen

- Translation (von allen Gittern erfüllt)
- Spiegelung
- Rotation
- Inversion

Es gibt 7 Symmetriegruppen mit einem oder mehreren Bravais Gitter. Das ergibt 14 mögliche Bravais Gitter.

Das einfachste Gitter ist Kubisch $a = b = c$, und alle vektor orientiert 90° zu einander. Wir schauen die 3 kubischen Gitter in Detail an:



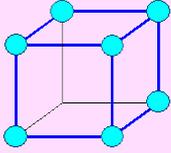
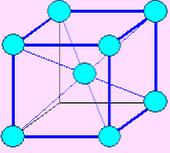
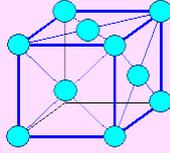
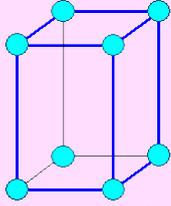
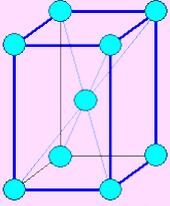
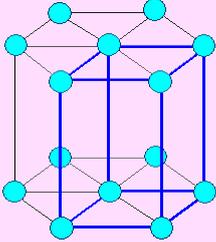
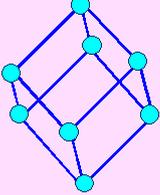
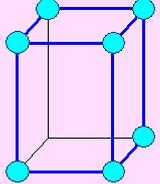
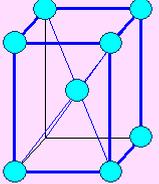
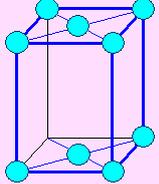
Volumen der Einheitszelle $V = a \times b \cdot c$

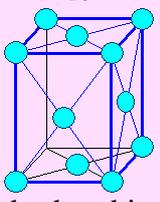
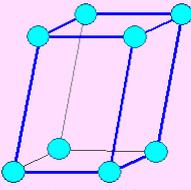
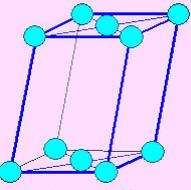
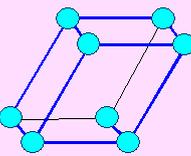
Für die Einheitszelle werden die Punkte (Atome) zwischen benachbarten Zellen geteilt. Zum Beispiel, $1/8$ der Eckbasis im kubischen Gitter zählt zur Gesamtzahl der Atome in der Zelle.

	Einfach kubisch	Raumzentriert	Flächenzentriert
Volumen der Einheitszelle	a^3	a^3	a^3
Anzahl der Gitterpunkte / Einheitszelle	1	2	4
Volumen der primitiven Zelle	a^3	$\frac{1}{2} a^3$	$\frac{1}{4} a^3$
Anzahl der nächsten Nachbarn	6	8	12

Die Gitter werden komplizierte wenn die relative Längen von a , b und c so wie die Winkeln zwischen den Vektoren variieren können.

In der Tabelle alle 7 Symmetriegruppen mit den 14 Bravais Gitter sind aufgelistet

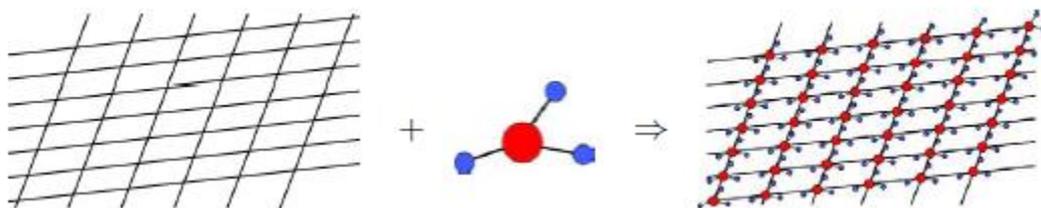
Name des Kristallsystems Länge der Basisvektoren	Achsenwinkel	Zugehörige Bravaisgitter (gelegentlich sind nur "sichtbare" Gitterpunkte (= blaue Kreise) eingezeichnet)		
Kubisch $a_1 = a_2 = a_3 = a$ = Gitterkonstante	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	 kubisch-primitiv	 kubisch-raumzentriert	 kubisch-flächenzentriert
Tetragonal $a_1 = a_2 \neq a_3$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	 Tetragonal-primitiv	 Tetragonal-raumzentriert	
Hexagonal $a_1 = a_2 \neq a_3$ Üblich: $a_3 = c$ Hex. Ebene = Basisebene	$\alpha = \beta = 90^\circ,$ $\gamma = 120^\circ$	 Hexagonal (EZ ist ergänzt um hex. Symmetrie zu zeigen)		
Rhomboedrisch oder Trigonal $a_1 = a_2 = a_3$	$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	 Rhomboedrisch		
Othorhombisch $a_1 \neq a_2 \neq a_3$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	 	 	

		Orthorhombisch h-primitiv	Orthorhombisch h-raumzentriert	Orthorhombisch- basisflächenzentriert rt  Orthorhombisch- flächenzentriert
Monoklin $a_1 \neq a_2 \neq a_3$	$\alpha = \beta = 90^\circ,$ $\gamma \neq 90^\circ$	 Monoklin- primitiv		 Monoklin- basisflächenzentriert rt
Triklin $a_1 \neq a_2 \neq a_3$	$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq$ 90°	 Triklin		

Kristallgitter

Ein Kristallgitter besteht aus einem Gitter und einer *Basis*.

Basis – die Bausteine des Kristalls – Atome, Moleküle, etc. Die basis kann einzeln oder verschiedene Atome/Ionen beinhalten (e.g. NaCl).



Echte Gitter variieren stark in Volume, Packungsdichte, Symmetrie an hand die verschiedenen Basismaterialien.

NaCl – Bravais Gitter

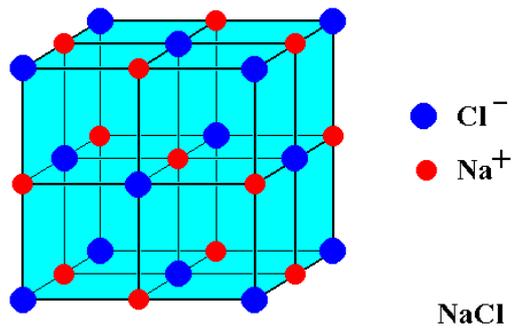
Flächenzentriert (fcc) (typische Struktur für Salz)

Die Basis hat ein Cl⁻ und ein Na⁺ Ion

Cl⁻: (000, ½ ½ 0, ½ 0 ½, 0 ½ ½)

Na⁺: (½ ½ ½, 00½, 0½0, ½ 00)

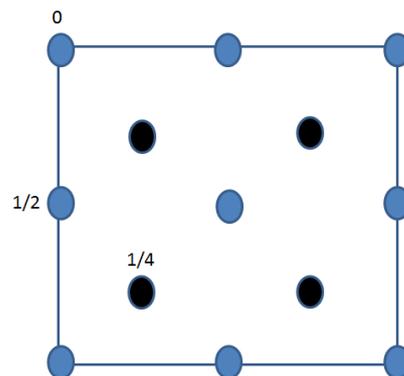
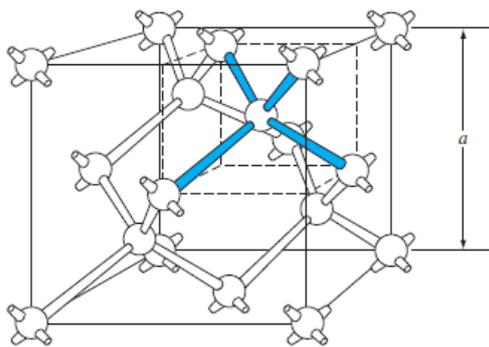
a = 5.64 Angstroms



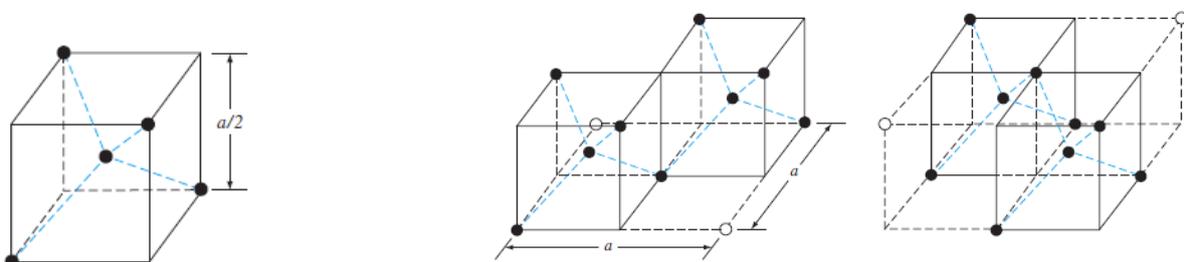
Diamantstruktur – Kein Bravais Gitter

Beispiele: Diamant, Silizium, Germanium.

Das ist nicht ein einfaches Bravais Gitter, und es ist nicht möglich die Einheitszelle zu wählen, so dass es nur 1 Atome beinhaltet. Die Struktur besteht aus verbundenen 2 fcc ähnliche Strukturen – ein fängt bei 000 an, und die 2te ist rotiert und verschoben um ¼¼¼.



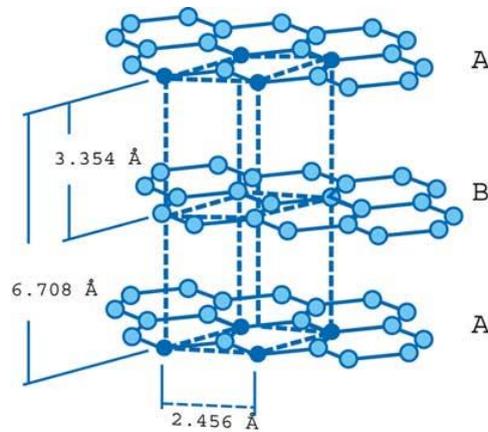
Der Grundbaustein ist ein bcc ohne 4 Eckpunkte. Dies and then build the lattice with this building block



ELEMENT	CUBE SIDE a (Å)
C (diamond)	3.57
Si	5.43
Ge	5.66

Graphite

Graphite besteht aus mehrere Schichten Graphen. Die Einheitszelle ist ein Wabbenstruktur (kein Bravais Gitter)



(from electronics cooling)

Das Gitter ist höchst anisotropisch. Die physikalischen Eigenschaften von Graphit sind stark abhängig von der Richtung der Einheitsvektoren. Kohlenstoff kann als Diamant, Graphene/Graphit, Fullerenen, usw. vorkommen.

Millersche Indizes

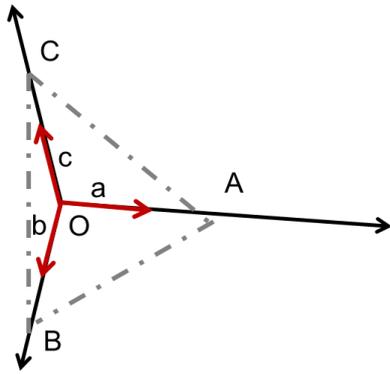
Statt die Basis werden häufig in der Kristallographie die *Kristallebene* benutzt, um die Kristallstruktur zu beschreiben. Die Kristallebene kann durch 3 Punkte beschrieben werden. Die Punkte sind die Axenabschnitte, wo die Kristallebene die Einheitszelle schneidet. Die Kristallebene zeigen Translationssymmetrie (es gibt einen Satz von äquivalenten Ebenen in einem Gitter).

Millersche Indizes werden benutzt, um die Kristall- oder Gitterebene zu bezeichnen:

- Die Zahl von Millerschen Indizes ist gleich der Dimension des Gitters
- h, k, l sind die Indizes, die die Ebene beschreiben
- (h, k, l) ist ein Punkt im Gitter
- (hkl) ist eine Ebene im Gitter
- $\langle hkl \rangle$ ist eine Richtung
- $\{hkl\}$ ist eine Familie äquivalenter hkl -Ebenen
- h, k, l werden nach $r = ha + kb + lc$ so gewählt, dass h, k, l ganzzahlig sind, z.B. $(1, \frac{1}{4}, \frac{1}{2}) = (4, 3, 2)$ und die kleinsten Zahlen so, dass das Verhältnis zwischen den 3 bleibt. Negative h, k, l werden mit Strich markiert

Um die hkl -Werte für eine Ebene zu bestimmen

- Bestimmen die Achsenabschnitte der Ebene
- Reziprok von Achsenabschnitt nehmen (z.B. $\infty = 0$)



Millersche Indize vereinfachen die Beschreibung einer Ebene.

Betrachten wir die Ebene oben. Die Ebene kann beschrieben werden durch

Punkte: A, B, C

Dimensionen: $|OA| = n_1$, $|OB| = n_2$, $|OC| = n_3$

Einheitsvektoren: a, b, c

So, dass die Ebene mit Punkten A, B, C ist

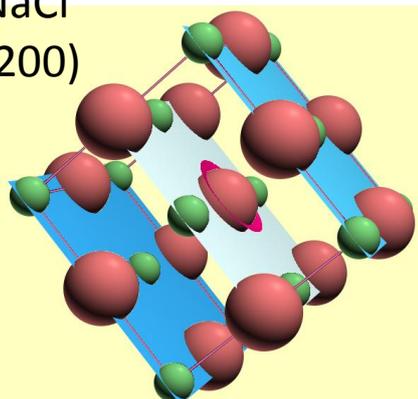
$(n_1 \ a, \ n_2 \ b, \ n_3 \ c)$

Oder

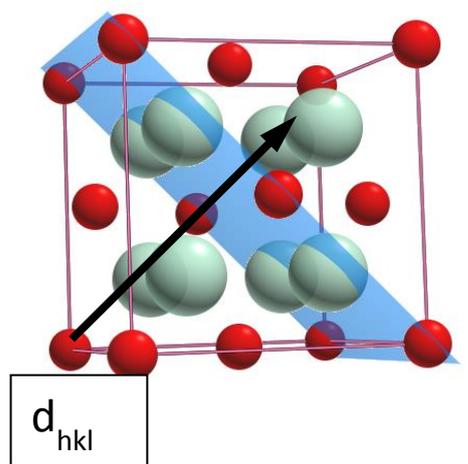
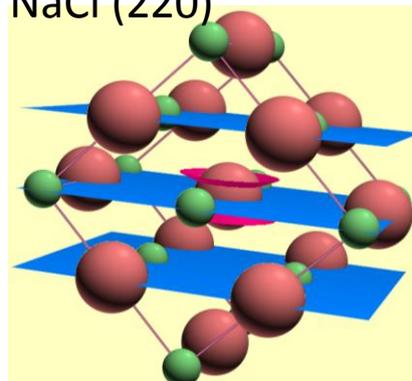
$$h : k : l = n_1^{-1} : n_2^{-1} : n_3^{-1}$$

Wo h,k,l die kleinste Zahlen sind, die das Verhältniss zwischen den Reziprokenvektor wiedergeben

NaCl
(200)

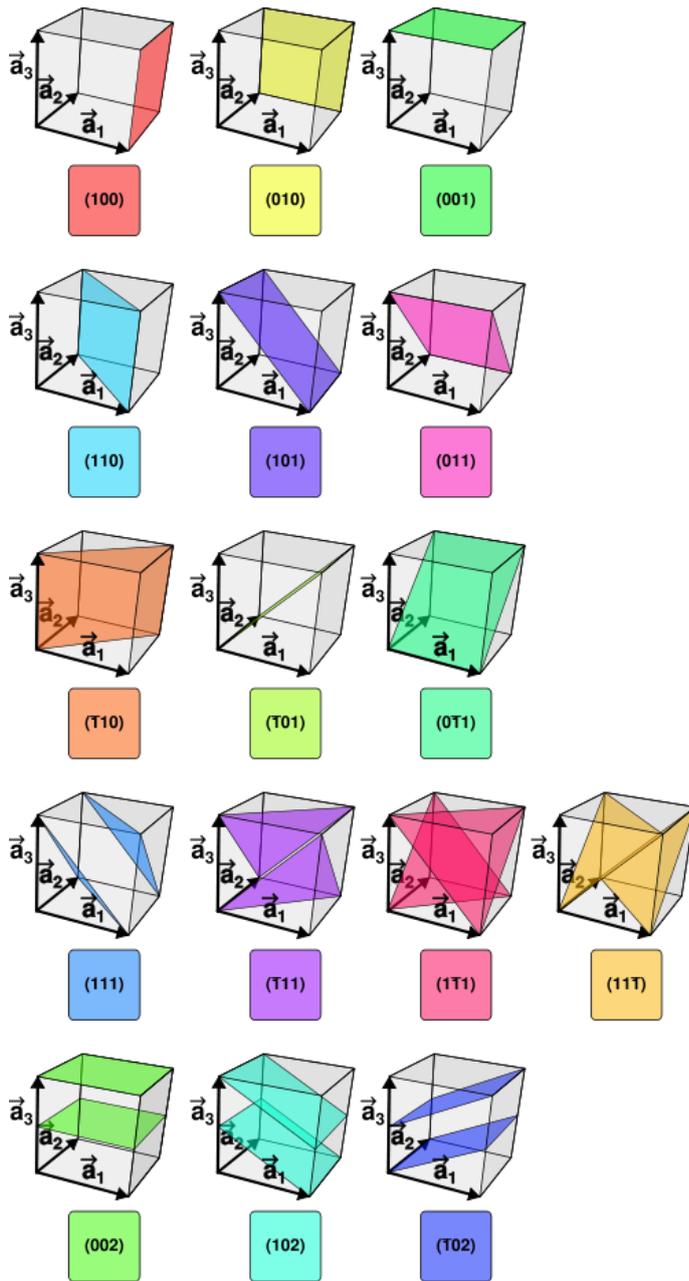


NaCl (220)



Der Vektor d_{hkl} ist senkrecht zu den hkl Ebene

Manche Ebene sind wegen Symmetrie äquivalent, z B für ein kubisches Kristall (100) (010) und (001) sind in der Familie {100}

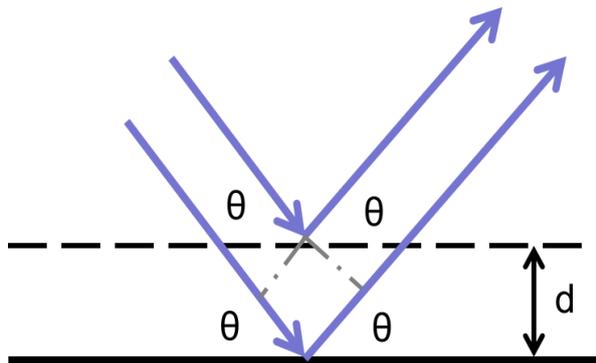


Kristallbeugung

Um die Struktur eines Kristalls zu bestimmen werden Licht oder Materiewellen mit einer Wellenlänge \sim atomarer Abstand (10^{-10} m) benutzt. Die Beugung dieser Wellen ergibt Information über die Kristallstruktur.

Braggbedingung

Wir eine Netzebene. Wenn Licht auf die Netzebene fällt, und elastisch gestreut wird, beobachten wir konstruktive und destruktive Interferenz der Strahlung abhängig von Einfallswinkel, Wellenlänge und Netzebeneabstand.



- *Monochromatisches Licht*
- *Theta_Einfall = Theta_Reflexion*

Reflektiertes Licht folgt einen Pfad, der länger ist bei

$$(3) \quad 2d \sin \theta$$

Konstruktive Interferenz findet statt wenn die Pfadlänge d

$$(4) \quad 2d \sin \theta = n\lambda$$

Wo n eine ganze Zahl ist. Das ist die Bragg Bedingung

Röntgenbeugung

Röntgenstrahlung hat eine Wellenlänge \sim a. Die Energie ist

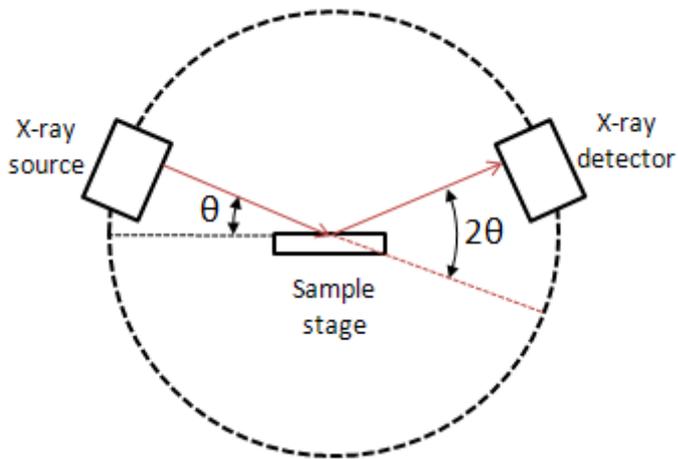
$$(5) \quad E = \frac{hc}{\lambda}$$

Für Röntgenstrahlung mit $\lambda = 1 \text{ \AA}$, die Energie ist 12 000 eV (eV = 1 J/C ist die benötigte Energie um ein Elektron durch ein Potential von 1 V zu bewegen).

Bei diesen Energien können die Röntgenstrahlen ziemlich tief ins Kristall eindringen, um Strukturinformation zu bestimmen. Die Röntgenstrahlung wechselwirkt primär mit Elektronen im Atom, aus diesem Grund sind schwere Atome leichter zu detektieren.

Aus Röntgenbeugung bekommt man die (hkl) Information (Kristallstruktur)

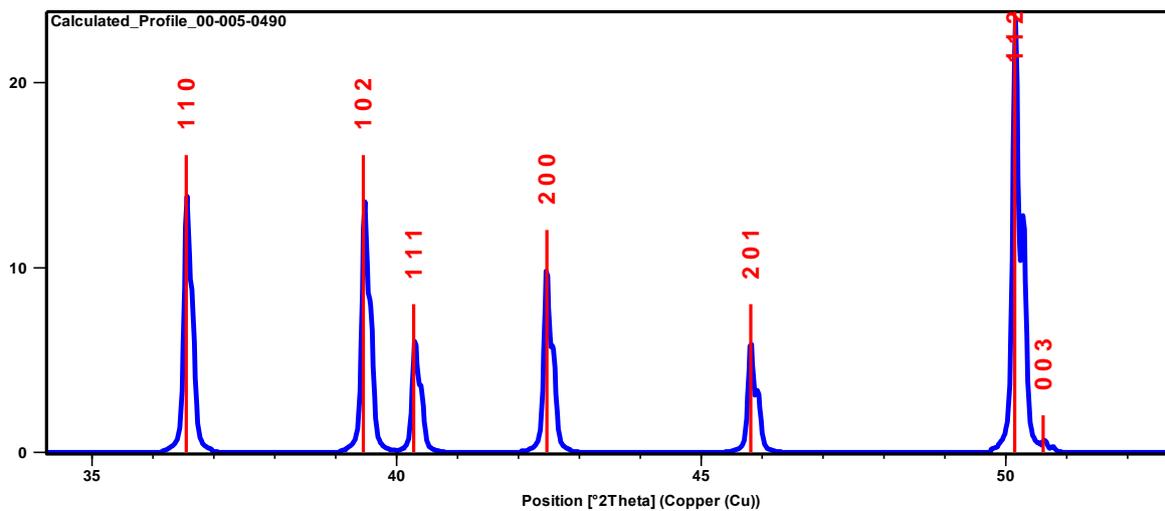
Messung



Röntgenwellenlänge wird konstant gehalten bei λ

Probe wird Rotiert damit θ variiert

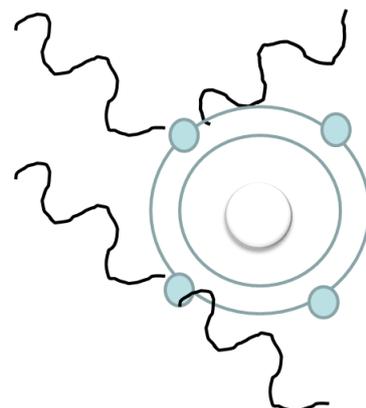
Ein Signal wird für eine kristalline Probe bei $2d_{hkl} \sin \theta = n\lambda$ detektiert.



Atomische Streuung Faktor

Röntgenstrahlen wechselwirken mit den Elektronen und $\lambda \sim$ mit dem Radius der Elektronorbitale.

Das bedeutet, dass der Einfallswinkel ein Einfluss hat bei der Messung. Bei großem Winkel ist wirkt das Atom wie eine Punktladung, und beim kleinen Winkel streuen die Röntgenstrahlen unterschiedlich stark.



$$f = \sum_{n=1}^Z \int_0^{\infty} \frac{4\pi r^2 \psi_n^2 \sin[4\pi r(\sin \theta) / \lambda]}{4\pi r(\sin \theta) / \lambda} dr$$

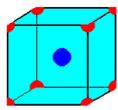
Wo Z = Elektronenzahl, ψ = Radiale Komponent der Elektronwellenfunktion, r = Radius

Bei

$$\sin \theta \approx 0 \rightarrow f = Z$$

f ist eine Korrektur, die Atomische Streuungsfaktor für klein Winkelmessungen.

Beispiel



unit cell Cesium Chloride

CsCl Kristall - 1 Cl^- and 8 x $1/8$ Cs^+ Ionen. Besteht aus 2 primitiven kubischen Gitter. Die Atome sind so positioniert, dass die Röntgenstrahlen 90° Phasenverschoben sind. Wenn Cl und Cs genau die gleiche atomische Streuungsfaktor hätten, würde kein Röntgenstreuung beobachtet werden.

Strukturfaktor F_{hkl}

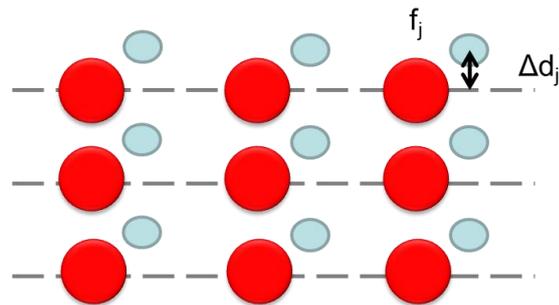
Kristalle bestehen nicht immer aus einer homogenen Basis. F_{hkl} berücksichtigt die räumliche Verteilung der Basisatome.

Die konstruktive/destruktive Interferenz der Atome kann unterschiedlich sein, und das verzerrt die Beugungsdaten.

Beispiel Ein Kristall mit 2 Atome in der Basis.

Ein Atome ist Δd_j aus der Ebene verschoben, wird ein Phasenunterschied erzeugt:

$$\Phi_j = 2\pi d_j / d_{hkl}$$



Um den Effekt zu berücksichtigen wird die Strukturfaktor F_{hkl} benutzt.

$$(7) \quad F_{hkl} = \sum_{j=1}^N f_j \exp(i\Phi_j)$$

Reziprokgitter

Kristall – Gitter + Basis, Länge m , Vektor \mathbf{r}

Reziprokgitter – Punkte im Reziprokraum, Länge in m^{-1} , Wellenvektor $\mathbf{k} = 2\pi/\lambda \mathbf{d}_{hkl}$ ist auch ein Vektor im Reziprokraum, und beschreibt den Inversenabstand zwischen Gitterebene

Wo λ ist die Wellenlänge von Elektronen, Phononen

Reziprokgittervektoren

Ein Vektor im Raum

$$\vec{r} = n_1 \vec{a} + n_2 \vec{b} + n_3 \vec{c}$$

Der Reziprokgitter

$$(9) \quad \vec{r}^* = m_1 \vec{a}^* + m_2 \vec{b}^* + m_3 \vec{c}^*$$

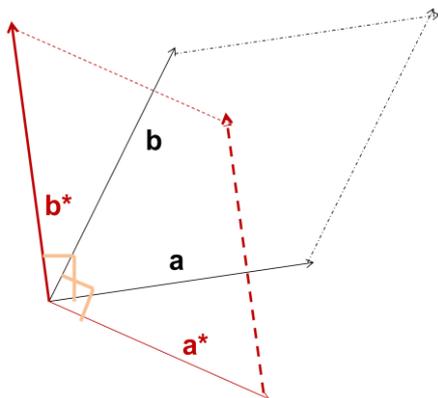
Wo \mathbf{a}^* , \mathbf{b}^* und \mathbf{c}^* sind die Einheitsvektoren im Reziprokraum. Diese Vektoren haben klar definierte Längen und Orientierungen in Bezug zu \mathbf{a} , \mathbf{b} und \mathbf{c} .

Orientierung von \mathbf{a}^* , \mathbf{b}^* und \mathbf{c}^*

\mathbf{a}^* ist senkrecht zu den realen Vektoren \mathbf{b} , \mathbf{c} ; \mathbf{b}^* ist senkrecht zu \mathbf{c} ; und \mathbf{c}^* ist senkrecht zu \mathbf{a} , \mathbf{b} . Aber, die Orientierung von \mathbf{a} und \mathbf{a}^* sind sonst unabhängig.

$$(10) \quad \mathbf{a}^* \bullet \mathbf{b} = \mathbf{a}^* \bullet \mathbf{c} = \mathbf{b}^* \bullet \mathbf{c} = \mathbf{b}^* \bullet \mathbf{a} = \mathbf{c}^* \bullet \mathbf{a} = \mathbf{c}^* \bullet \mathbf{b} = 0$$

Ein Beispiel für ein 2D Gitter und Reziprokgitter:



Länge von \vec{a}^* , \vec{b}^* und \vec{c}^*

$$(11) \quad \vec{a}^* \bullet \vec{a} = \vec{b}^* \bullet \vec{b} = \vec{c}^* \bullet \vec{c} = 1$$

Ein "großes" Gitter im realen Raum ergibt ein kleines Gitter im Reziprokraum .

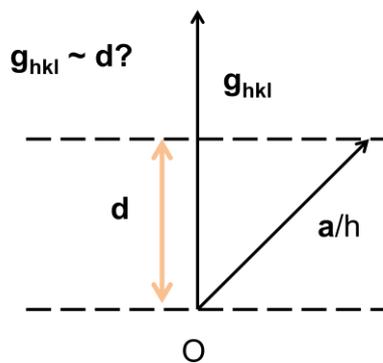
Wir können allgemeine Definition für \vec{a}^* , \vec{b}^* und \vec{c}^* schreiben

$$(12) \quad \vec{a}^* = \frac{\vec{b} \times \vec{c}}{V}; \vec{b}^* = \frac{\vec{c} \times \vec{a}}{V}; \vec{c}^* = \frac{\vec{a} \times \vec{b}}{V}$$

Wo das Volume der Einheitszelle ist

$$V = \vec{a} \bullet \vec{b} \times \vec{c}$$

Der Reziproktor \vec{g} im Bezug zu d (Abstand zwischen Gitterebene), Punkt O und A



Phononen

Die Atome in einem Gitter sind nicht fest, und können wegen thermische Energie sich bewegen. Wegen der Periodizität des Gitters, sind Gittervibration wellenartig (die, die nicht periodisch sind werden schnell gedämpft).

Longitudinale Wellen – Teilchen bewegt sich parallel zur Welle (niedrigere Energie)



Transverse Welle – Teilchen bewegt sich senkrecht zur Welle (hohe Energie). Dazu gibt es 2 möglichkeit für diese Bewegung



Die Geschwindigkeit einer longitudinale Welle ist durch die Schallgeschwindigkeit beschrieben

$$v_o = \lambda f = (B_s / \rho)^{1/2}$$

Wo B_s ist die Steifheitkoeffizient, und ρ ist die Dichte

Anisotropie kann das verfälschen, aber stimmt für viele Materialien

Material	Crystal Structure	Atomic spacing (A)	Density ρ (kg/m ³)	Stiffness Coeff. (B_s)	Predicted v_o (m/s)	Experimenal v_o (m/s)
Na	BCC	3.71	970	0.52	2320	2250
Cu	FCC	2.55	8960	13.4	3830	3880
Si	Diamond	2.35	2330	10.1	9150	6600
Ge	Diamond	2.44	5360	7.9	5400	3830

Ein Phonon (Gittervibration) kann beschrieben werden durch

- Geschwindigkeit v
- Wellenlänge/Wellenvektor $|\mathbf{k}| = (2\pi/\lambda)$
- Frequenz $\omega = (2\pi f) = (vk)$

Phononenstatistik und die Wärmekapazität

Phononen können durch eine Dispersionsrelation (E vs k) beschrieben werden, zB für $\lambda \gg r_0$. Für sehr kleine Wellenlänge (große k) ändern sich die Wellenbewegunge sich mit der Zeit (dispersiv) und werden gedämpft.

Phononen spielen eine wichtige Rolle in der Wärmeleitfähigkeit

- Transport von Wärme

$$\frac{dQ}{dt} = -KA \frac{dT}{dx}$$

Q – Wärme, t – Zeit, K – Wärmeleitfähigkeit, A- Querschnittsfläche, T – Temperatur

Der Zusammenhang zwischen ortliche und zeitliche Änderungen in T im Körper ist

$$\frac{dT}{dt} = \frac{K}{\rho c} \frac{d^2T}{dx^2}$$

ρ – Dichte, c – Wärmekapazität des Körpers und ist definiert als

$$C = cm = \frac{dQ}{dT}$$

Parameter um materialspezifische Änderungen in T zu beschreiben

Classische Beschreibung von C

Es ist intuitiv, dass Phononen eine Rolle bei der Wärmeleitfähigkeit spielen.

Die Energie der Atome im Kristall (nach der Äquipartition) ist

$$E = E_{kin} + E_{pot}$$

$$E = \frac{1}{2}mv_x^2 + \frac{1}{2}mv_y^2 + \frac{1}{2}mv_z^2 + \frac{1}{2}kx^2 + \frac{1}{2}ky^2 + \frac{1}{2}kz^2$$

$$U = 6\left(\frac{1}{2}k_B T\right) = 3k_B T$$

So für ein Kristall mit N Atome (Petit-Dulong)

$$C_v = \frac{\partial U}{\partial T} = 3Nk$$

Das ist unabhängig von Temperatur.

Allerdings experimentell wird was anders beobachtet

- hohe T – $C_v \sim T$ unabhängig
- niedrige T – $C_v \sim T^3$

Wo kommt die Temperaturabhängigkeit her?

Phononen als Quantenteilchen

Gitterbewegungen können selber klassisch beschrieben werden. Die entstehen aber durch Wechselwirkung mit Quantenteilchen (Elektronen, Photons). Deshalb ist die Energie der Phononen auch quantisiert.

Das Einstein Modell

Einstein hat Plancks Arbeit an schwarzen Körper/Strahlung auf Phononen übertragen. Ein Festkörper besteht aus N identische harmonische Oszillatoren im Gleichgewicht. Die Oszillatoren haben Energie

$$E = \hbar \omega$$

Die Wahrscheinlichkeit, dass ein Oszillator $E = E_n$ hat ist

$$P(E) = \frac{\exp(-E_n / kT)}{\sum_{n=0}^{\infty} \exp(-E_n / kT)}$$

Und die mittlere Energie eines Oszillators mit Frequenz ω ist

$$\langle E \rangle = \frac{\sum_0^{\infty} E_n \exp(-E_n / kT)}{\sum_0^{\infty} \exp(-E_n / kT)} = \frac{\hbar \omega}{[\exp(-\hbar \omega / kT) - 1]}$$

Die mittlere Zahl von Oszillatoren mit ω ist

$$\langle n \rangle = \frac{1}{[\exp(\hbar \omega / kT) - 1]}$$

Einstein hat angenommen, dass die N Atome $3N$ Vibrationsmoden (x,y,z) haben, und dass alle Oszillatoren unabhängig von einander Frequenz ω_e haben, und ω hängt von T ab

$$U = \frac{3N\hbar \omega}{[\exp(\hbar \omega / kT) - 1]}$$

So

$$C_v = \frac{\partial U}{\partial T} = 3Nk \frac{(\hbar\omega / kT)^2 \exp(\omega / kT)}{[\exp(\hbar\omega / kT) - 1]^2}$$

Where the 2nd term in the expression is known as the Einstein function.

Qualitativ gute Übereinstimmung mit Experiment. Die Annahme, dass alle Phononen die gleiche Frequenz besitzen ist eher unrealistisch.

Das Debye Modell

Im Debye Modell können die Oszillatoren Frequenzen von 0 – ω_{\max} besitzen. Die Zahl der verschiedenen Moden ist durch die Zustandsdichte $g(\omega)$ bestimmt so dass

$$3N = \int_0^{\omega_m} g(\omega) d\omega$$

Die Systemenergie ist

$$U = \int_0^{\omega_m} \frac{\hbar\omega \cdot g(\omega) d\omega}{[\exp(\hbar\omega / kT) - 1]}$$

Was ist $g(\omega)$?

Wir nehmen an das akustische (niedrige Energie) Wellen das Spektrum dominieren. Die Wahrscheinlichkeit für hohe Energie Moden ist gering, so wir können die vernachlässigen.

$$v_o = \lambda f = \frac{\omega}{k}$$

Und in 3D haben wir (Gesamtzahl von Moden)

$$N(k) = \frac{\frac{4}{3} \pi k^3}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3} = \frac{L^3}{6\pi^2} k^3$$

$$\frac{1}{v_o^3} = \frac{1}{3} \left(\frac{1}{v_x^3} + \frac{1}{v_y^3} + \frac{1}{v_z^3} \right)$$

$$N(\omega) = \frac{L^3}{2\pi^2 v_o^3} \omega^3$$

Und die Dichte von Moden

$$g(\omega) = \frac{1}{V} \frac{N(\omega)}{d\omega} = \frac{3}{2\pi^2 v_o^3} \omega^2$$

Und dann die Bedingung, dass alle Vibrationsmoden ergeben

$$3N/V = \int_0^{\omega_m} g(\omega) d\omega = \left(3\omega_D^2 / 2\pi^2 V_o^3 \right)$$

ω_D ist die Debye-Frequenz, ein Materialparameter. Häufiger wird aber die Debye-Temperatur verwendet:

$$\theta_D = (\hbar\omega_D / k_B) = (\hbar v_o / k_B) (6\pi^2 N / V)^{1/3}$$

Das ist die „Temperatur“, die das klassische Verhalten und Quantenverhalten der Phononen trennt

So

$$U = \left(\frac{3\hbar}{2\pi^2 v_o^3} \right) \int_0^{\omega_D} \frac{\omega^3 d\omega}{[\exp(\hbar\omega / kT) - 1]}$$

Wenn

$$x = (\hbar\omega / k_B T)$$

$$U = \left(\frac{9Nk_B T^4}{V\theta_D^3} \right) \int_0^{(\theta_D/T)} \frac{x^3 dx}{[\exp(x) - 1]}$$

und

$$C_v = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_v = \left(\frac{9Nk_B T^3}{V\theta_D^3} \right) \int_0^{(\theta_D/T)} \frac{x^4 e^x dx}{[\exp(x) - 1]^2}$$

Für hohe Temperaturen ergibt das (Dulong and Petit)

$$C_v \approx 3Nk_B$$

Und für niedrige Temperaturen kriegen wir

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

$$C_v = \frac{12Nk_B}{5V} \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^3$$