

Moderne Physik II

gehalten von Prof. Pimenov
im Sommersemester 2008
— In Überarbeitung —
L^AT_EX von Maximilian Michel

27. August 2008

Inhaltsverzeichnis

1	Klassifizierung von Festkörpern	6
1.1	Einleitung	6
1.2	Klassifizierung nach Struktur	7
1.3	Klassifizierung nach Bindung	12
2	Struktur der Kristalle	13
2.1	Kristallstruktur	13
2.2	Symmetrieoperationen	13
2.3	Bravais Gitter	16
2.4	Positionen, Richtungen, Ebenen	19
2.5	Einfache Kristallstrukturen	20
2.6	Kristallfehler	25
3	Beugung von Wellen an Kristallen	28
3.1	Reziproke Gitter	28
3.2	Brillouin Zonen	29
3.3	Strahlung für Materialuntersuchungen	32
3.4	Streuung am dreidimensionalen Gitter	34
3.5	Fourier-Analyse der Basis	37
3.6	Experimentelle Methoden	40
4	Dynamik von Kristallgittern	42
4.1	Einleitung	42
4.2	1 – Atomare lineare Kette	42
4.3	Zweiatomare lineare Kette	45
4.4	p -Atome in der primitiven Zelle	49
4.5	Experimenteller Nachweis durch Neutronenstreuung	49
4.6	Thermische Eigenschaften von Phononen	49
4.7	Die Wärmeleitung von Isolatoren	56
5	Elektronen im Festkörper	58
5.1	Das freie Elektronengas	58
5.2	Elektronen im periodischen Potential	63
5.3	Elektronische Eigenschaften fester Stoffe	67
6	Halbleiter	71
6.1	Charakteristische Eigenschaften	71
6.2	Beispiele	71
6.3	Bandstrukturen	71
6.4	Ideal und Realhalbleiter	73

Inhaltsverzeichnis

6.5	Eigenleitung (ohne Dotierung und Störstellen)	73
6.6	Ladungsträgerkonzentration dotierter Halbleiter	75
6.7	p - n -Übergang im Gleichgewicht	76

Allgemeines

Bemerkung. Das Skript befindet sich in einer kompletten Überarbeitung.

Weiteres zur Vorlesung auf der Pimenov-Homepage

Literatur

1. KITTEL, *Einführung in die Festkörperphysik* („Bibel der Festkörperphysik“)
2. ASHCROFT/MERMIN *Solid State Physics* („Teilweise etwas kompliziert“)
3. DERMTRÖDER *Experimentelle Physik 3* („Teilweise lückenhaft, besonders im weiteren Verlauf des Semesters“)

Außerdem gibt es vom Springer Verlag diesen nützlichen Link. Allerdings ist dieses PDF-File nur über die Uni-Homepage oder im Uni-Netz erreichbar.

1 Klassifizierung von Festkörpern

1.1 Einleitung

Aufgaben der Festkörperphysik:

Eigenschaften **fester Körper** zu erforschen, zu untersuchen und zu deuten. Es werden die

- mechanischen
- thermodynamischen
- elektrischen
- magnetischen und
- optischen

Eigenschaften von Materialien analysiert und interpretiert.

Definition. Bevor wir weiter im wahren Sinne des Wortes in die Materie eindringen, definieren wir den Begriff **fest**, da **feste Körper** die Grundlage dieser Vorlesung sind. Bekannt sind die drei Aggregatzustände:

- fest
- flüssig
- gasförmig

Diese unterscheiden sich auf atomarer bzw. molekularer Ebene durch ihr Verhältniss zwischen der kinetischen Energie und der (potentiellen) Wechselwirkungsenergie. Die einzelnen Aggregatzustände sind folgendermaßen gekennzeichnet:

Gas hat eine hohe kinetische Energie (E_{kin}), aber eine geringe Wechselwirkungsenergie, diese wird durch Stöße übertragen, ist aber nur kurzreichweitig. Es besitzt weiter keine atomare Ordnung

Flüssigkeit: Die Übertragung von Wechselwirkungsenergie findet zwischen den **nächsten Nachbarn** statt. Die kinetische Energie und potentielle Energie sind in etwa von der gleichen Größenordnung. Die **Nahordnung** reicht über mehrere Teilchenabstände. Die Teilchen sind immer noch frei verschiebbar und sie befinden sich in ständige Umordnung

Festkörper (Dies ist keine Definition, sondern eher eine Beschreibung) erhält man, in dem man dem Stoff weiter die kinetische Energie entzieht. Dabei können, je nach Art der Abkühlung folgende Fälle auftreten:

Schnelles kühlen: Hier werden Ordnungsvorgänge unterbrochen. Es bilden sich **amorphe Festkörper** heraus. Dies entspricht einer Momentaufnahme einer Flüssigkeit, genannt **unterkühlte Flüssigkeit**, oder auch **Gläser**

langsames abkühlen: Bildung von regelmäßigen Strukturen mit **langreichweitiger Ordnung (Fernordnung)** zum Beispiel Kristallen

Bemerkung. Nicht so offensichtlich ist, dass die Niedrigenergiekonfiguration tatsächlich kristalin ist.

Beispiele.

1. Existenz **allotroper Strukturen (gleichberechtigter Strukturen)**. Beispiele hierfür sind Graphit/Diamant/Fullerene. Nur eine kann Gleichgewicht sein.
2. Innere Energie von Gläsern: In der Vorlesung gehen wir davon aus, dass wir überwiegend kristalline Materialien vorliegen haben, sogar ideale Einkristalle. Siehe dazu auch Kapitel 1.2

Skizze 1 aus VL

1.2 Klassifizierung nach Struktur

In der Festkörperphysik klassifiziert man die Festkörper nach ihrer Struktur. Man unterscheidet im Wesentlichen:

1. Kristalle
2. amorphe Materialien, wie Gläser oder Polymere
3. Flüssigkristalle
4. Quasikristalle
5. Fraktale.

1.2.1 Kristalle

Definition. Kristalle sind streng geordnete Festkörper mit einer Translationssymmetrie. Gruppen von Atomen oder Molekülen sind hierbei so angeordnet, dass sie in periodischer Weise immer wieder aneinandergesetzt werden können.

Skizze 2 aus VL

Vom Aufbau her ist es ein zweidimensionales Kristallgitter mit einer **Einheitszelle**. Diese Zelle kann nach einer Translation um $n \cdot \vec{a} + m \cdot \vec{b}$ (mit $m, n \in \mathbb{N}$) exakt wiedergefunden werden. Alle Eigenschaften und Erscheinungen kann man aus einer einzigen Einheitszelle herausfinden. Die Zelle kann eine beliebige komplexe Anordnung von „Bausteinen“ aufweisen.

1.2.2 Amorphe Materialien

Man unterscheidet hier nochmal in

Gläser: als unterkühlte Flüssigkeiten. Es gibt keine exakt definierbare Grenze des fester werdenden Materials. Man Definiert die Grenze beliebig. Zum Beispiel als Punkt mit charakteristischen **Relaxationszeit** ist $\tau = 100s$
Des weiteren gibt es

Polymere: Wobei es hier keine **Translationssymmetrie** gibt. Dies ist ein allgemeines Kennzeichen von Polymeren.

Betrachten wir nochmals die Gläser genauer:

- **Oxidgläser** (SiO_2 , B_2O_3 , ...)
- **Metallgläser** ($Zr_{11}Ti_{14}Cu_{13}Ni_{10}Be_{22}$) (Sie haben herausragende mechanische Eigenschaften)
- **niedrigmolekulare Molekülschmelzen** (Glyzerin $C_3H_8O_3$)
- **Salzschmelzen** wie beispielsweise $CaNO_3$ sind sehr gute Ionenleiter

16.04.08

Wie erreicht man Glaszustand?

Jedes Material kann Glassartig hergestellt werden, wenn

- die Abkühlrate groß genug, oder
- das Probenvolumen klein genug ist.

Im Glas ist die nächste Nachbarschaft noch sehr ähnlich zum Kristall, aber auf weiten Strecken geht die Translationssymmetrie verloren.

Folie

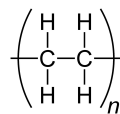
Die sogenannte **Paarkorrelationsfunktion** gibt die ungefähre Anzahl der Nachbarn als Funktion des Abstandes r an.

Folie

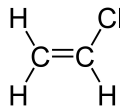
Polymere

Definition. Polymere oder auch **Makromoleküle** bestehen aus einer großen Anzahl molekularer Bausteine. Es handelt sich um überwiegend **organische Verbindungen**. Hierbei ist Kohlenstoff Hauptbestandteil in Verbindung mit *H*, *O*, *N*, *F*, *Cl*. Polymere werden durch Aneinanderreihung kleiner molekularer Einheiten **synthetisiert**. Diesen Vorgang bezeichnet man als **Polymerisation**

Beispiel. Ethylen ist ein Monomer (**Ethen**).



Beispiel. PVC (Polyvinylchlorid)



Architektur, Struktur von Polymeren bestimmt zum Beispiel die mechanischen Eigenschaften.

1.2.3 Flüssigkristalle

Flüssigkristalle sind die Basis aller **LCD's (Liquid-Crystal-Display's)**.

schematisch: Flüssigkeiten bestehen aus **stäbchenförmigen Molekülen**. Sie bilden Phasen mit Orientierungsordnung (die über elektrische Felder ausgerichtet werden können) aber keine Ordnung der Schwerpunkte besitzen, also keine Translationsymmetrie haben. Die Flüssigkeit hat also eine Ordnung, aber keine Struktur.

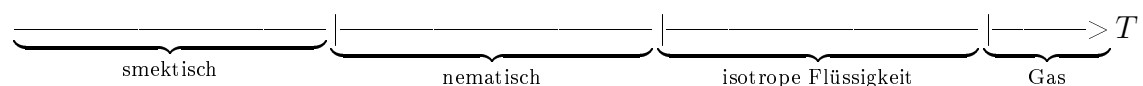
Skizze 3 aus VL

Entdeckt wurden sie bereits 1888 von F. REINITZER. Bei 145°C verflüssigt sich Cholesterinbenzonat, zunächst aber in eine milchig trübe Schmelze. Diese wird bei etwa 175°C klar und durchsichtig. Sie wurden um 1900 als „scheinbar lebende Kristalle“ bezeichnet.

Erste Anwendungen fanden die Flüssigkristalle 1966 in der digitalen Zahlensarstellung.

Chemischer Aufbau des PAA (*p*-Azoxynaisol):

Hier fehlt die Strukturformel in Abhängigkeit von Temperatur werden unterschiedliche Phasen ausgebildet.



1 Klassifizierung von Festkörpern

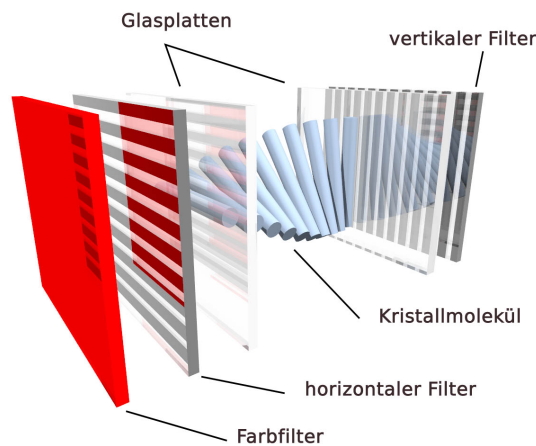


Abb. 1.1: Das Bild zeigt die prinzipielle Funktionsweise eines stromdurchflossenen LCD (hier mit rotem Farbfilter)

Die Flüssigkristalle ordnen sich auch in Abhängigkeit der Temperatur T an, deswegen finden sie auch Anwendung in Temperatursensoren.

Da in den meisten Verbindungen die Moleküle ein Dipolmoment tragen, richten sie sich in einem elektrischen Feld aus. Dies ist das Grundprinzip eines jeden LCD's (siehe hierzu Abb. 1.1 auf Seite 10).

1.2.4 Quasikristalle

22.04.08

Die Quasikristalle wurden erst 1984 entdeckt. Namen, die damit in Zusammenhang stehen sind: SHECHTMAN, BLECH, GRATIAS und CAHN.

Skizze 4 aus VL

Sie beobachteten bei einer $Al - Mn$ - Legierung ungewöhnliche Beugungsbilder: Sie sahen scharfe Reflexe mit **ikosaedrischer Symmetrie**.

Fünffache Symmetrie gibt es aber nach **Punktgruppensymmetrie** (nach einer Drehung von Gittern um einen Drehpunkt um $\frac{360^\circ}{5} = 72^\circ$ entsteht wieder das gleiche Gitterbild) in Festkörpern nicht, dies widerspricht der Translationssymmetrie.

Heute sind mehr als 50 Legierungen mit dieser Symmetrie bekannt. ($i \equiv$ **icosaedral**).



Die Abmessungen der Einheitszelle können bis 1cm Kantenlänge betragen!

Die **Quasiperiodizität** kann man durch **aperiodische Konstruktionsvorschrift** erklären. Als Beispiel die **Fibonacci-Folge**:



Abb. 1.2: Blumenkohlfraktal

Zwei Längen L und S sind durch eine **irrationale Zahl** verknüpft.

$$\frac{L}{S} = 2 \cos 36^\circ \approx 1,62 \quad ??$$

Mit der Bildungsvorschrift „Schreibe L für S und LS für L “ für die nächste Reihe erhält man folgende Pyramide:

1	L
2	LS
3	LSL
4	LSLLS
5	LSLLSLSL
6	LSLLSLSLLSLLS

1.2.5 Fraktale

Definition. Fraktale sind durch ihre **Selbstähnlichkeit** charakterisiert. Ihre Struktur sieht auf **allen** Längenskalen ähnlich aus.

Beispiel. 1. Küstenlinie

2. In der Natur: der Blumenkohl (Siehe Abb. 1.2 auf Seite 11)

3. Materialien (Schäume): **Silica, Aerogels;**

Materialen mit vielen Hohlräumen und sehr niedriger Dichte ($\approx 0,1 \frac{g}{cm^3}$)

4. Mathematisch SIERPINSKI, GASKET (siehe auch Abb. 1.3 auf Seite 12)

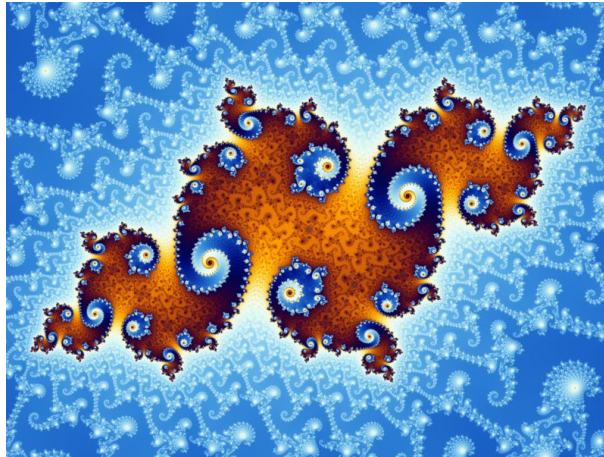


Abb. 1.3: Fraktal in der Mathematik

Skizze 6 aus VL!

1.3 Klassifizierung nach Bindung

Bindungsenergie in $\frac{kcal}{mol}$	
Ionenbindung,	150-250
kovalente Bindung	150-300
Metall	25-200
Van der Waals/Wasserstoffbindung	1-3!

2 Struktur der Kristalle

2.1 Kristallstruktur

Definition. Ein idealer Kristall wird durch unendliche Wiederholung identischer **Struktureinheiten** im dreidimensionalen Raum aufgebaut. **Struktureinheit** einfachster Kristalle (zumeist Metalle wie Beispielsweise *Cu*, *Ar*, *Fe*, *Al*) bestehen nur aus einem einzigen Atom.

Oft wird die **Struktureinheit** aus mehreren Atomen oder Molekülen gebildet. Die unendliche Wiederholung wird durch das Gitter beschrieben.

Die **Translationsvektoren** $\vec{a}_1$, $\vec{a}_2$, $\vec{a}_3$ beschreiben das Gitter.

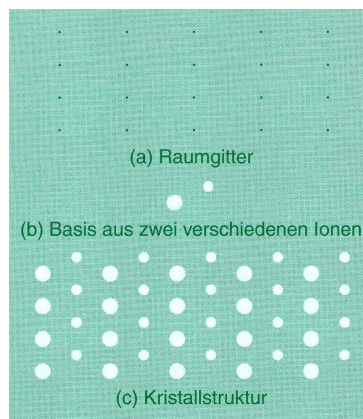


Abb. 2.1: Eine Kristallstruktur entsteht, wenn an jedem Gitterpunkt in (a) eine Basis (b) angefügt wird. Wenn man (c) betrachtet, kann man die Basis erkennen und danach ein Raumgitter finden. Die Lage der Basis relativ zu ihrem Gitterpunkt ist ohne Bedeutung.

Der Vektor $\vec{r} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3$ mit $n_1, n_2, n_3 \in \mathbb{Z}$ erreicht **jeden** Punkt des Gitters.

Symmetrioperationen eines Kristalls

Symmetrioperationen eines Kristalls können aus **Gittertranslationen** und **Punktooperationen**, also aus Translation und Rotation bestehen.

2.2 Symmetrioperationen

Definition. **Gitterpunktgruppen** sind **Symmetrioperationen** eines Gitters (ohne dabei die Basis zu betrachten).

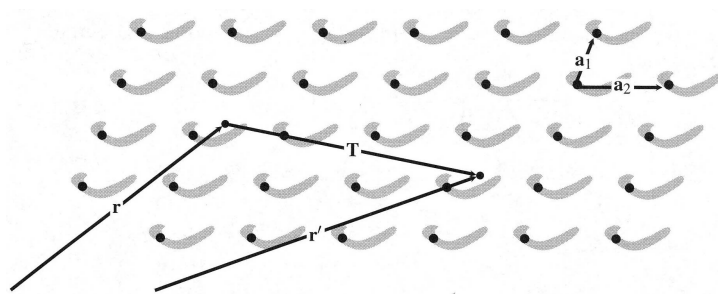


Abb. 2.2: Teil eines imaginären Kristalls aus Proteinmolekülen in einer zweidimensionalen Welt. (Wir wählen ein Proteinmolekül, weil es als komplexes Teilchen normalerweise keine Eigensymmetrie aufweist). Die Anordnung der Atome in dem Kristall sieht für einen Beobachter am Ort r' genau so aus wie für einen Beobachter am Ort r , vorausgesetzt, dass der Vektor T , der r' und r verbindet, als ganzzahlige Linearkombination der Vektoren a_1 und a_2 geschrieben werden kann. In unserem Beispiel ist $T = -a_1 + 3a_2$. Die Vektoren a_1 und a_2 sind primitive Translationsvektoren des zweidimensionalen Gitters

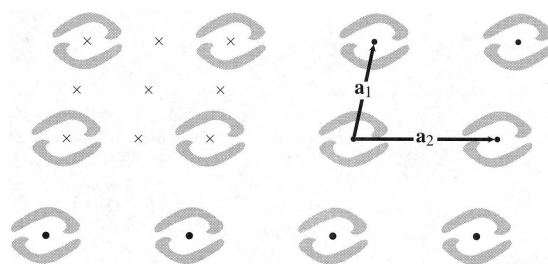


Abb. 2.3: Die Anordnung ist hier ähnlich wie in Bild 2.2 jedoch sind die Proteinmoleküle paarweise angeordnet. Die Translationsvektoren des Kristalls sind a_1 und a_2 . Eine Drehung von 180° um einen der mit „ $\times$ “ bezeichneten Punkte führt den Kristall in sich selbst über. Dies gilt ebenso für entsprechende Punkte in anderen Zellen, obwohl die Punkte nur in einer Zelle eingezeichnet sind.

Einige mögliche Symmetrioperationen sind (außer Translation):

- **Inversion.** (I) $x, y, z \rightarrow -x, -y, -z$
- **Drehung** um eine Symmetrieachse: $c_n : \varphi = \frac{2\pi}{n}$,

n	2	3	4	6
C_n	180°	120°	90°	60°

(andere Zahlen widersprechen der Translationssymmetrie!)

Beispiel. C_2 (z -Achse): $x, y, z \rightarrow -x - y, z$

- **Spiegelung** an der i, j - Ebene σ_{ij} ,
 $\sigma_{xy} : x, y, z \rightarrow x, y, -z$

ht

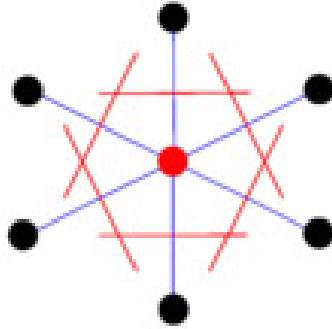


Abb. 2.4: Beispiel einer zweidimensionalen Wigner-Seitz-Zelle

Beispiel.

$$I = C_2(z)c \circ \sigma_{xy}$$

Basis: Alle Punkte (Atome) werden relativ zu einem Gitterpunkt durch den Ortsvektor $\vec{r}_i = x_1\vec{a}_1 + x_2\vec{a}_2 + x_3\vec{a}_3$ beschrieben, wobei $0 \leq x_1, x_2, x_3 \leq 1$

Skizze 11 aus VL

das **Parallelepiped** a_1, a_2, a_3 beschreibt die **Elementarzelle**. Die sogenannte **primitive Elementarzelle** ist eine Zelle mit kleinstmöglichem Volumen

$$V = |a_1 \cdot a_2 \times a_3|$$

$$V = \begin{vmatrix} a_{1x} & a_{1y} & a_{1z} \\ a_{2x} & a_{2y} & a_{2z} \\ a_{3x} & a_{3y} & a_{3z} \end{vmatrix}.$$

Es gibt mehrere Möglichkeiten eine Elementarzelle zu wählen

Skizze 12 aus VL

Es muss aber unterschieden werden:

- primitive Elementarzellen haben das gleiche (minimale) Volumen,
- nichtprimitive Elementarzellen können auch ein vielfaches dieses Volumens haben.

Stellen wir uns nun ein **Parallelepiped** als elementare Zelle im 3D Gitter vor. Diese Zelle wird von 8 Punkten begrenzt, allerdings „gehören“ diese Punkte auch zu acht weiteren Elementarzellen, sodass letztendlich $8 \cdot \frac{1}{8} = 1$ Punkt pro Zelle nur übrig bleibt.

Beispiel. Skizze 13 aus VL

Beispiel. Wigner-Seitz-Zelle

Konstruktion einer Wigner Seitz Zelle

2 Struktur der Kristalle

1. Man zeichne alle Verbindungsgeraden von einem Punkt zu allen Nachbarpunkten (in 2.4 blau eingezeichnet)
2. weiter konstruiere die Mittelsenkrechten im 3 dimensional (hier rot dargestellt)
3. das kleinste dadurch entstandene Volumen ist die **Wigner Seitz Zelle**

Vorteile dieser Zelle sind:

Vorteil 1 Ein Punkt pro Zelle reicht zur Beschreibung aus

Vorteil 2 Siehe Kapitel 3.2

2.3 Bravais Gitter

Definition. Es gibt aus Gründen der Symmetrie im Dreidimensionalen „nur“ 14 Gittertypen, die sogenannten **Bravais Gitter** in 7 Kristallsystemen. Betrachtet man das magnetische Dipolmoment, so werden daraus um die tausend verschiedene Typen.

Beispiele.

Im

1D existiert nur ein Gittertyp, nämlich die Linie

2D sind es bereits 5 Gittertypen (Siehe auch Abb. 2.5):

1. schiefwinkliges Gitter
2. rechtwinkliges Gitter $|\vec{a}_1| \neq |\vec{a}_2|$, $\varphi = 90^\circ$
3. zentriertes rechtwinkliges Gitter $|\vec{a}_1| \neq |\vec{a}_2|$, $\varphi = 90^\circ$
4. hexagonales Gitter $|\vec{a}_1| = |\vec{a}_2|$, $\varphi = 120^\circ$
5. quadratisches Gitter $|\vec{a}_1| = |\vec{a}_2|$, $\varphi = 90^\circ$

3D gibts schon 14 Gittertypen

- das **allgemeine Gitter** ist das **Triklin**. Es wird durch folgende Eigenschaften beschrieben: $|\vec{a}_1| \neq |\vec{a}_2| \neq |\vec{a}_3|$, $\alpha \neq \beta \neq \gamma (\neq 90^\circ)$
- Das **kubische System** hat drei Gittertypen (siehe Abbildung 2.6):

1. **einfach Kubisch** (sc= **single cubic**)

2. **kubisch Raumzentriert** (bcc=**body centered cubic**) ist ähnlich dem sc System, hat aber noch einen Punkt in der Mitte. Das Volumen des primitiven Teils dieser Zelle berechnet sich mit $V = \frac{1}{2}a^3$.

3. **flächenzentriert Kubisch** (fcc=**face centered cubic**). Das heißt, in der Mitte jeder Fläche gibt es zusätzlich noch ein Gitterpunkt. Die Anzahl der Punkte berechnet sich aus:

$$\underbrace{8 \cdot \frac{1}{8}}_{\text{Eckpunkte}} + \underbrace{\frac{1}{2} \cdot 6}_{\text{Flächenpunkte}} = 4$$

Das Volumen der enthaltenen Zelle dieses Gitters ist $V = \frac{1}{4}a^3$.

- das **hexagonale System**: primitive Zelle $\times 3$ = hexagonales Prisma. $a_1 = a_2 \neq a_3$, $\gamma = 120^\circ$, $\beta = \alpha = 90^\circ$ (Siehe Abbildung 2.7)

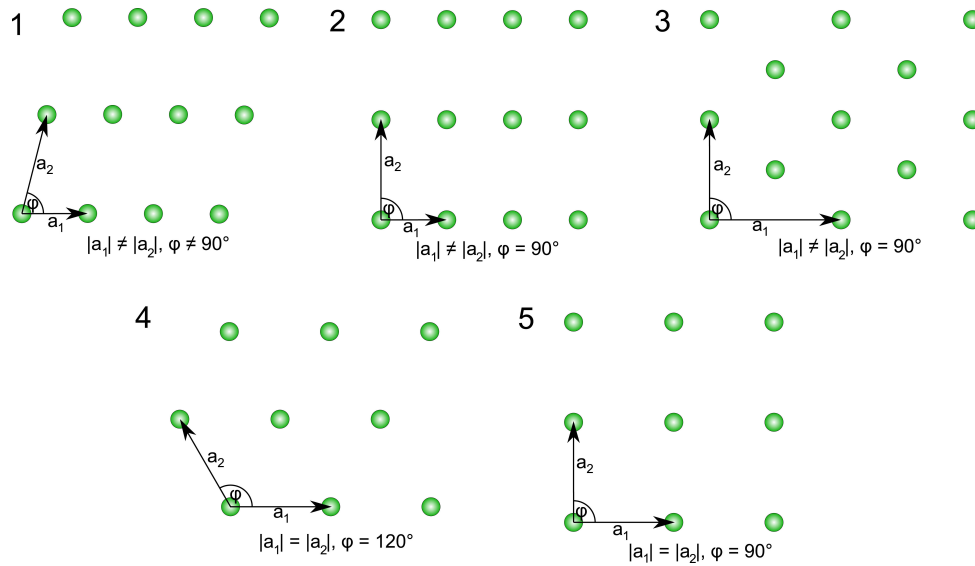
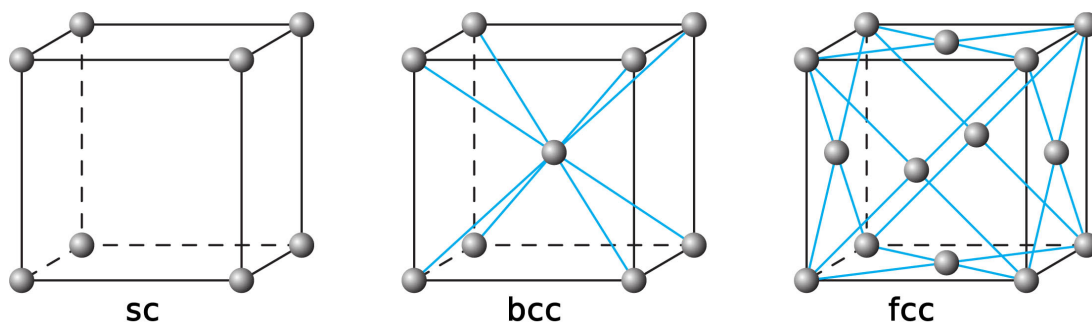
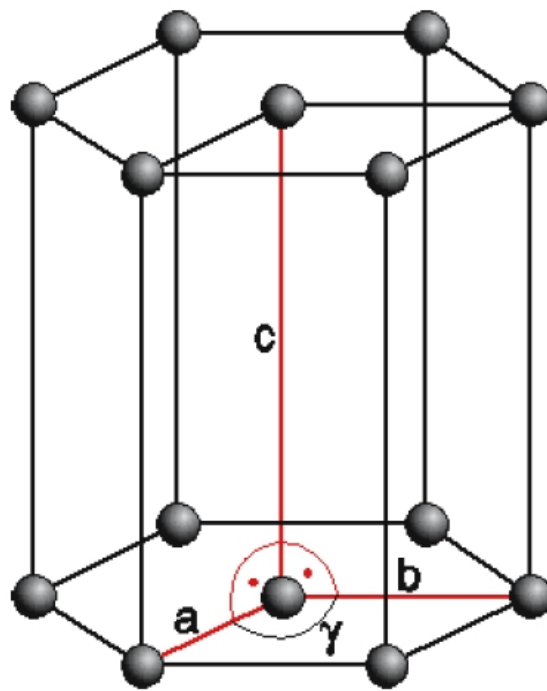


Abb. 2.5: Gitterstrukturen im zweidimensionalen Raum


Abb. 2.6: Einfache (**sc**), volumenzentrierte (**bcc**) und flächenzentrierte (**fcc**) kubische Gitter



Hexagonal
 $a = b \neq c$
 $\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$

Abb. 2.7: Hexagonales System

2.4 Positionen, Richtungen, Ebenen

30.04.08

2.4.1 Position

Beispiel. Die Mitte des Würfels

2.4.2 Richtungen

$$\vec{r}_m = \frac{1}{2}\vec{a}_1 + \frac{1}{2}\vec{a}_2 + \frac{1}{2}\vec{a}_3 = \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$$

Mit den Richtungen $u_1\vec{a}_1 + u_2\vec{a}_2 + u_3\vec{a}_3$. Man benötigt zur Beschreibung einer Richtung nur zwei Punkte, also den Koordinatenursprung und einen beliebigen weiteren Punkt. In der Notation verwendet man: $[1, 0, 0]$ als a_1 Richtung und $[\bar{1}, 0, 0]$ als umgekehrte a_1 Richtung. $[1, 1, 1]$ ist dann die **Raumdiagonale**.

Ebenen (Millersche Indizes)

Die Position einer Ebene **kann** durch Angaben dreier Schnittpunkte mit den Koordinatenachsen festgelegt werden. Dazu gibt es zwei Regeln:

1. Als erstes bestimme man die Schnittpunkte in Einheiten der Gitterparameter

Beispiel. $(4, 1, 2)$,

2. danach bilde man die Kerwerte $\left(\frac{1}{4}, 1, \frac{1}{2}\right)$ und suche 3 ganze Zahlen, die zueinander im gleichen Verhältnis stehen $(1, 4, 2)$ (Normalerweise kleinste Zahlen).

Das Ergebnis in runden Klammern heißt **Indizierung** der Ebene $(1\ 4\ 2)$

- Eine Indizierung bezeichnet entweder **eine** Ebene oder **alle parallelen** Ebenen
- liegt der Schnittpunkt im unendlichen ist der zugehörige Index „0“

$$\infty, \infty, 1 \rightarrow (0, 0, 1)$$

Abbildung 2.8 zeigt 9 Würfel mit den Schnittebenen. Hierbei ist zu sehen, dass

- a) in der ersten Reihe diese Schnittebenen auf einer Seitenfläche liegen
 - b) in Reihe zwei diese durch die Diagonale der Grundfläche gehen und
 - c) in der letzten Reihe durch alle Diagonalen des Würfels verlaufen.
- zusätzliche Möglichkeiten:

negativer Schnittpunkt **kann** mit negativen Index bezeichnet werden.

$$\frac{1}{2}, \infty, \infty \rightarrow 2, 0, 0 \quad (1, 0, 0)$$

$(2, 0, 0)$ liegt parallel zu $(1, 0, 0)$, schneidet aber die x -Achse bei $\frac{1}{2}$

Merke. Es gilt: Die Richtung von (h, k, l) steht senkrecht zur (h, k, l) -Ebene. Die Schnittpunkte mit Koordinatenachsen $\left(\frac{1}{h}, \frac{1}{k}, \frac{1}{l}\right)$ in kleinsten Koordinaten.

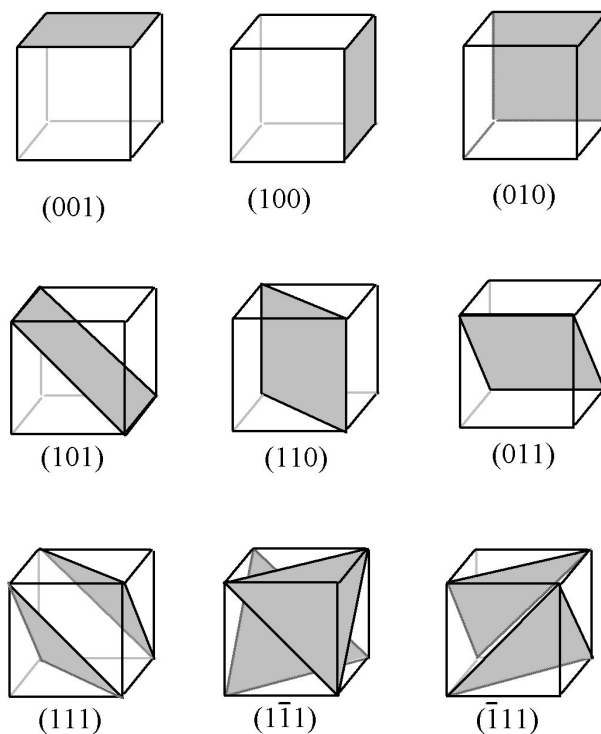


Abb. 2.8: Ebenen im Kubus mit den Schnittebenen der Millerschen Indizes

2.5 Einfache Kristallstrukturen

Führen wir an dieser Stelle eine Strukturanalyse von **Kochsalz**, als $NaCl$ und Caesiumchlorid $CsCl$ durch:

- (a) $NaCl$ besitzt eine fcc Struktur (siehe Abbildung 2.6 auf Seite 17) und die Basis besteht aus: $1 \times Na + 1 \times Cl$.

In Abbildung 2.9 auf Seite 21 (Entnommen aus KITTEL) hat die Basis die Koordinaten: Cl $(0, 0, 0)$, und Na $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$. Man kann aber auch für die Basis folgende Atome wählen: Cl $(0, 0, 0)$, Na $(\frac{1}{2}, 0, 0)$

Die Koordinationszahl (hier: 6) ist gleich der Anzahl der nächste Nachbarn (ebenfalls 6). Außerdem besteht eine Zelle aus 4 $NaCl$ Einheiten.

Andere Beispiele für eine $NaCl$ – Struktur:

Kristall	$NaCl$	$AgBr$	MgO
a (Å)	5,63	5,77	4.2

Primitive Zelle der fcc Struktur, ihr Volumen beträgt: $\frac{1}{4}a^3$.

$$\begin{aligned}
 a_1 : \left(\frac{a}{2}, \frac{a}{2}, 0 \right) &= \frac{a}{2} |(1, 0, 0)| \\
 a_2 : &= \frac{a}{2} |(0, 1, 1)| \\
 a_3 : &= \frac{a}{2} |(1, 0, 1)| \\
 \Rightarrow V &= \frac{a^3}{8} \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \end{vmatrix} = \frac{a^3}{8} (1 + 1 + 0) = \frac{a^3}{4}
 \end{aligned}$$

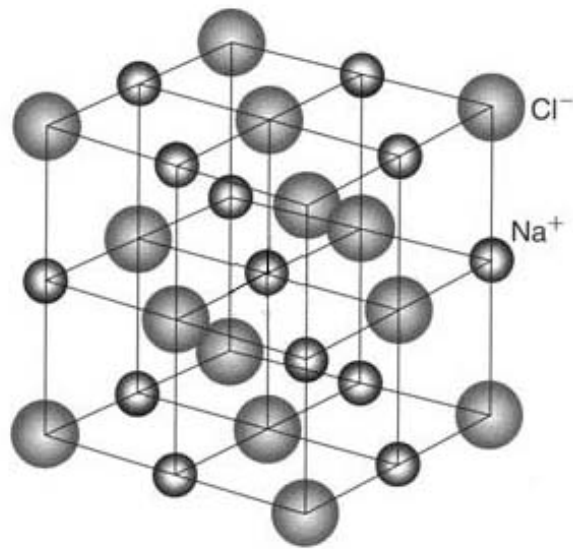


Abb. 2.9: Man kann die Kristallstruktur von NaCl aufbauen, indem man abwechselnd Na^+ - und Cl^- -Ionen auf die Gitterpunkte eines einfach kubischen Gitters setzt. Im Kristall ist jedes Ion umgeben von sechs nächsten Nachbarn entgegengesetzter Ladung. Das Raumgitter ist kubisch flächenzentriert (fcc) (siehe auch Abb. 2.6 auf Seite 17) und die Basis besteht aus einem Cl^- -Ion bei $(0,0,0)$ und einem Na^+ -Ion bei $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$. Das Bild zeigt eine gebräuchliche kubische Zelle. Die Ionendurchmesser sind hier im Vergleich zur Elementarzelle verkleinert dargestellt, um die räumliche Anordnung deutlicher zu machen.

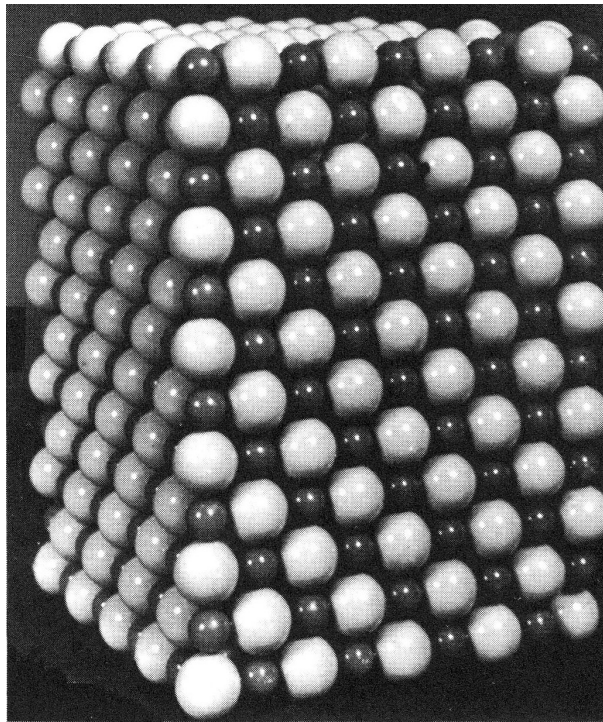


Abb. 2.10: Modell eines Natriumchlorids. Die Natriumionen sind kleiner als die Chlorionen (aus A.N. HOLDEN und P. SINGER).

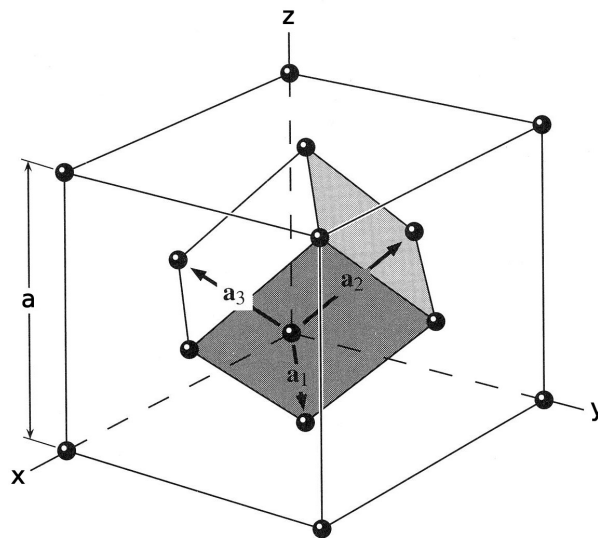


Abb. 2.11: Die rhombische primitive Zelle des kubisch flächenzentrierten Gitters. Die primitiven Translationsvektoren a_1, a_2, a_3 verbinden den Gitterpunkt am Ursprung mit den Gitterpunkten in den Flächenmittelpunkten. Wie sich aus der Zeichnung ergibt, sind **primitive Translationsvektoren**: $a_1 = \frac{a}{2}(\hat{x} + \hat{y})$, $a_2 = \frac{a}{2}(\hat{y} + \hat{z})$, $a_3 = \frac{a}{2}(\hat{z} + \hat{x})$. Die Winkel zwischen den Achsen betragen 60° . Hier sind $\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$ die kartesischen Einheitsvektoren.

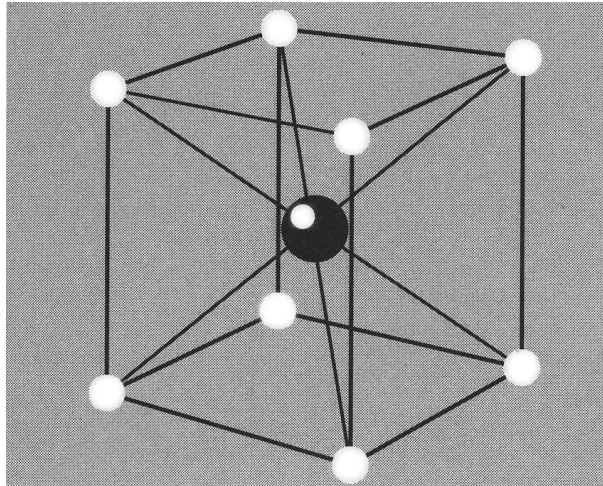


Abb. 2.12: Kristallstruktur von Caesiumchlorid. Das Raumgitter ist einfach Kubisch. Die Basis besteht aus einem Cs^+ -Ion bei $(0, 0, 0)$ und einem Cl^- -Ion bei $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$.

- (b) **Caesiumchlorid** ($CsCl$) hat eine *sc*-Struktur (siehe Abbildung 2.6 auf Seite 17 und Abbildung 2.12 auf Seite 23) deren Basis aus $1 \times Cs$, $1 \times Cl$ besteht. Die Koordinatenzahl ist 8, die Kantenlänge des Kubus ist $a = 4,11 \text{ \AA}$.
- (c) **Hexagonal dichteste Kugelpackung (hcp-hexagonal close-packed)**.
 Kristallographisch gesehen gibt es unendlich viele Möglichkeiten für dichteste Packung. Raumfüllung: $\simeq 0,74$. (Siehe hierzu Abbildung 2.13 auf Seite 24)

Folgende Kugelordnungen sind hierbei möglich:

- Erste Reihe $\equiv A$ (es gibt nur eine Möglichkeit)
- Zweite Reihe $\equiv B$ alle Möglichkeiten sind gleich
- Dritte Reihe
 1. über die Reihe A
 2. Zwischenplätze $\equiv C$
- Vierte Reihe
 1. wieder die Reihe B
 2. Erstmalige Wiederholung der Reihe A

$ABABAB \dots$ -hcp wie bei (Zn , He , Mg) (Siehe auch Abbildung 2.14 auf Seite 24).

$ABCABCAB \dots$ -fcc wie bei (Y , In)

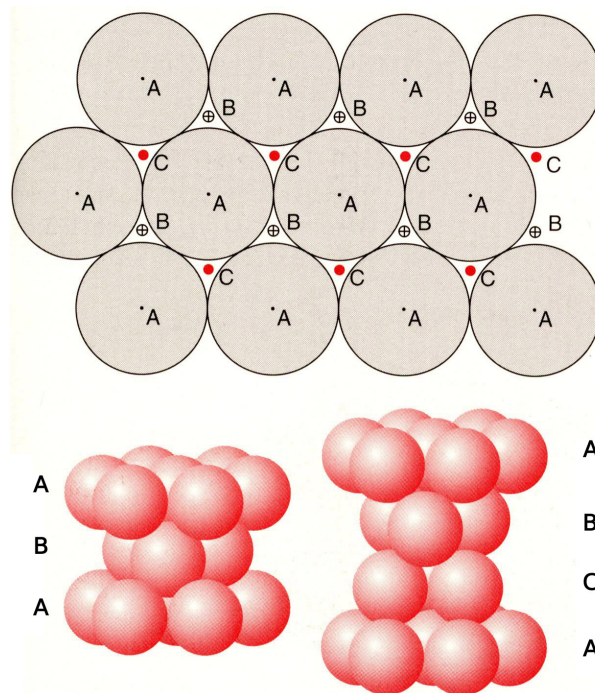


Abb. 2.13: Zur Unterscheidung der hexagonal dichtesten Kugelpackung mit der Packungsfolge *ABA* von der Packung bei *fcc* Struktur mit der Folge *ABCA*.

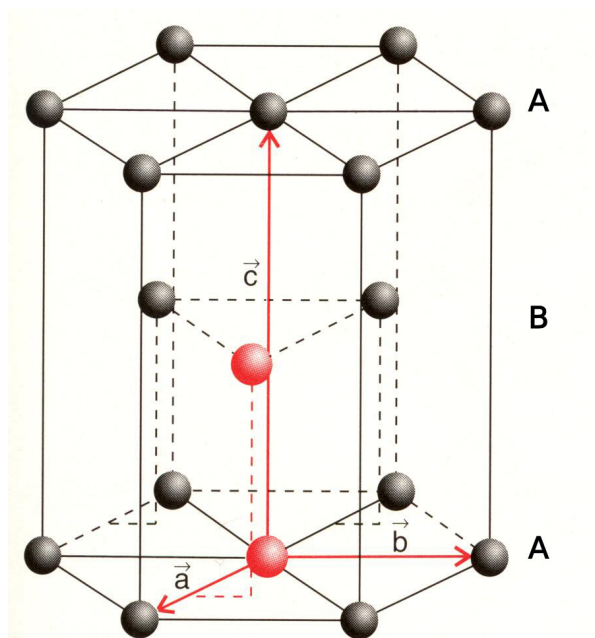


Abb. 2.14: **hcp** -hexagonales Raumgitter + Basis aus 2 Atomen $(0, 0, 0)$ und $(\frac{3}{8}, \frac{1}{8}, \frac{1}{2})$.
Dabei ist $c/a = 1,633$, $\varphi(\vec{a}, \vec{b}) = 120^\circ$, $|\vec{a}| = |\vec{b}|$, $\varphi(a, c) = \varphi(b, c) = 90^\circ$.

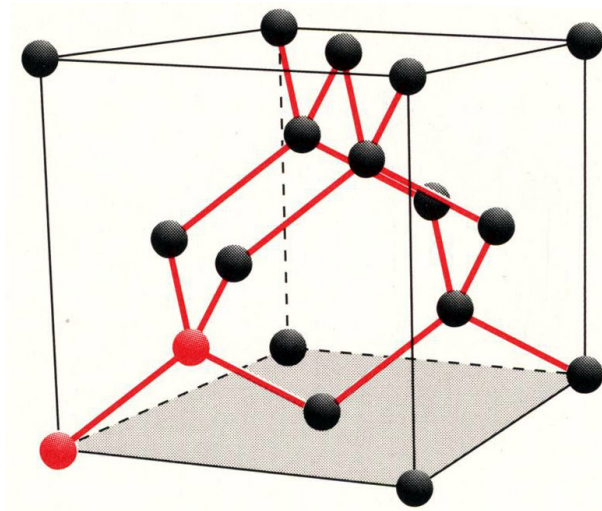


Abb. 2.15: Diamantstruktur des kubisch flächenzentrierten Gitters mit einer Basis aus zwei Atome.

(d) Des weiteren gibt es auch noch die **Diamantstruktur** (*fcc*), deren Basis aus zwei Atomen mit den Koordinaten $(0, 0, 0)$ und $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$ bestehen. (Siehe hierzu Abbildung 2.15 auf Seite 25)

Beispiel. $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}); (\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}) \Rightarrow d = \sqrt{(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2 + (z_1 - z_2)^2} = \frac{\sqrt{3}}{4}$

- es gibt keine Möglichkeit eine Basis aus nur einem Atom zu wählen.
- der Raumanteil **harter Kugeln** beträgt 34%
- der Kristall hat 4 nächste Nachbarn
- er hat eine gerichtete kovalente Bindung (sp^3 -**Hybridisierung**)

2.6 Kristallfehler

Fehler in der Kristallstruktur können:

1. thermische
2. wachstumsbedingte bzw.
3. durch Außeneinwirkung bedingte

Ursachen haben.

Dies hat natürlich auch Folgen.

Beispiele solcher Folgen sind:

- Veränderung der Leitfähigkeit im Halbleiter (Dotierung)

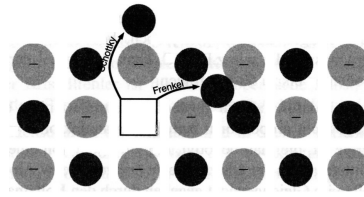


Abb. 2.16: SCHOTTKY- und FRENKEL-Defekte in einem Ionenkristall. Die Pfeile geben die Verschiebung der Ionen an. Bei einem Schottky-Defekt wird das Ion zur Oberfläche des Kristalls transportiert, beim Frenkel-Defekt zu einem Zwischen-gitterplatz.

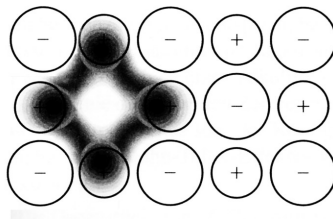


Abb. 2.17: Ein Frenkel-Zentrum besteht aus einer **Anionenlücke** und einem an die Leerstelle gebundenen **Überschusselektron**. Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Überschusselektrons ist in der Nähe der positiven Metallionen, die an die Leerstelle angrenzen, am größten.

- Veränderung der Farbe der Ionenkristalle (das heißt gewisse Farbspektren werden absorbiert, sodass ebendiese Farbanteile herausgefiltert werden und der Kristall in der Komplementärfarbe leuchtet).
- Veränderung der mechanischen Festigkeit.

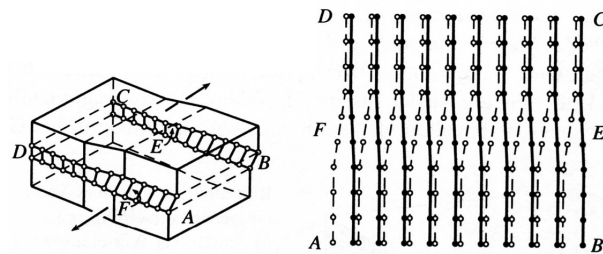


Abb. 2.18: Eine Schraubenversetzung. Der Teil $ABEF$ der Gleitebene ist in einer Richtung parallel zur Versetzungslinie EF abgeglitten. Man kann sich die Schraubenversetzung als spiralförmige Anordnung von Gitterebenen vorstellen, so dass nach einem vollständigen Umlauf um die Versetzungslinie die benachbarte Ebene erreicht wird. (Nach COTTRELL)

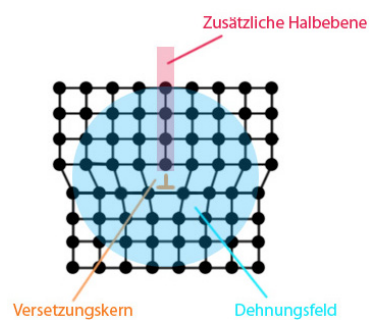


Abb. 2.19: Dehnung eines Kristalls um den Versetzungskern mit einem Dehnungsfeld. Dadurch verursacht entsteht eine neue zusätzliche Halbebene.

3 Beugung von Wellen an Kristallen

3.1 Reziproke Gitter

Es ist ein etwas abstraktes Verfahren aber sehr hilfreich für viele Probleme der Festkörperphysik, zum Beispiel bei der Erklärung der Streuung. Mit diesem „Kunstgriff“ kann man nicht nur die Beugungsbedingungen allgemein lösen.

Reziprokes Gitter

Ein **reziprokes Gitter** hat die drei Basisvektoren: $\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3$, folgendermaßen bestimmt durch die Basisvektoren des Raumgitters ($\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$):

$$\begin{aligned}\vec{b}_1 &= 2\pi \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\underbrace{\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 \times \vec{a}_3}_{\text{Volumen der Elementarzelle}}} = 2\pi \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{V_E} \\ \vec{b}_2 &= 2\pi \frac{\vec{a}_3 \times \vec{a}_1}{V_E} \\ \vec{b}_3 &= 2\pi \frac{\vec{a}_1 \times \vec{a}_2}{V_E}\end{aligned}$$

jeder Vektor $\vec{b}_j$ steht wegen des Kreuzproduktes orthogonal zu 2 Vektoren von $\vec{a}_i$, daher gilt:

$$\begin{aligned}\vec{b}_j \cdot \vec{a}_i &= \begin{cases} 2\pi \cdot 0 = 0, & \text{wenn } i \neq j \\ 2\pi \cdot 1 = 2\pi, & \text{wenn } i = j \end{cases} = 2\pi \cdot \delta_{ij} \\ \vec{G} &= \vartheta_1 \vec{b}_1 + \vartheta_2 \vec{b}_2 + \vartheta_3 \vec{b}_3,\end{aligned}$$

mit $\vartheta_i \in \mathbb{Z}$ und der Einheit von $\vec{G}$: $[m^{-1}]$. In Analogie zum Wellenvektor eines Photons existiert ein Photon mit $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ auch k -Raum bezeichnet. In Analogie zum Impuls eines Photons:

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

dieser wird auch als **Impulsraum** bezeichnet.

Es gilt hierbei:

- $\vec{G}(\vartheta_1, \vartheta_2, \vartheta_3)$ steht senkrecht zu den Ebenen $(\vartheta_1, \vartheta_2, \vartheta_3) = (h, k, l)$

- $|\vec{G}| = \frac{2\pi}{d_{hkl}}$ wobei d_{hkl} den Abstand zwischen benachbarten Ebenen (h, k, l) beschreibt

Merke:

Das **Beugungsbild eines Kristalles** entspricht der **Darstellung des reziproken Gitters**

3.2 Brillouin Zonen

Definition. Die Elementarzelle des Reziproken Gitters wird **nicht** als Parallelepiped $\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3$ gewählt sondern als **Wigner Seiz-Zelle** $\equiv$ erste Brillouin-Zone (Volumen aller Elementarzellen sind gleich, siehe hierzu auch Abb. 2.4, Seite 15).

Man kann viele Eigenschaften der Festkörper durch das Verhalten innerhalb der ersten **Brillouin-Zone** beschreiben, weil sie sich periodisch wiederholen.

Beispiel. Das eindimensionale (Raum-)Gitter: Hierbei ist der Abstand zwischen zwei benachbarten Punkten „ a “. Das reziproke Gitter ist ebenfalls ein eindimensionales Raumgitter, allerdings ist der Abstand hier nicht mehr a , sondern $\frac{2\pi}{a}$.

$$\vec{b}_1 = 2\pi \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 \times \vec{a}_3} \rightarrow 2\pi \frac{\bar{1} \times \bar{1}}{\bar{a} \cdot \bar{1} \times \bar{1}} \rightarrow \frac{2\pi}{a}$$

$$\vec{b}_1 \parallel \vec{a}_1$$

14.05.08

Beispiel.

$$bcc \xrightarrow{\text{reziprok}} fcc$$

$$fcc \xrightarrow{\text{reziprok}} bcc$$

$$\vec{b}_1 \sim [\vec{a}_2 \times \vec{a}_3]$$

$$\vec{b}_2 \sim [\vec{a}_3 \times \vec{a}_1]$$

$$\vec{b}_3 \sim [\vec{a}_1 \times \vec{a}_2]$$

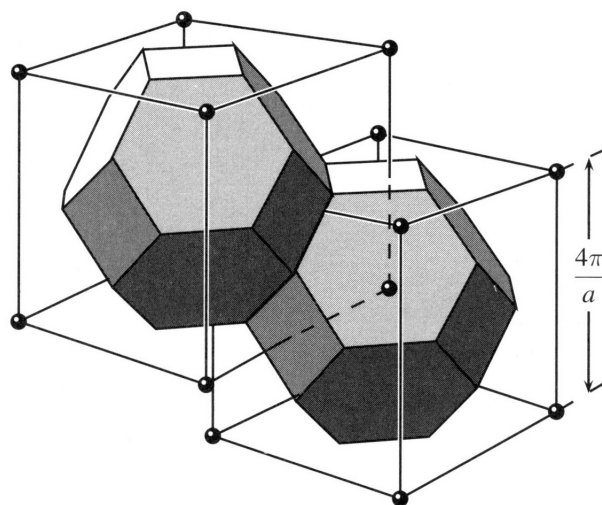


Abb. 3.1: **Brillouin-Zone** des kubisch flächenzentrierten Gitters im reziproken Raum; das reziproke Gitter ist raumzentriert

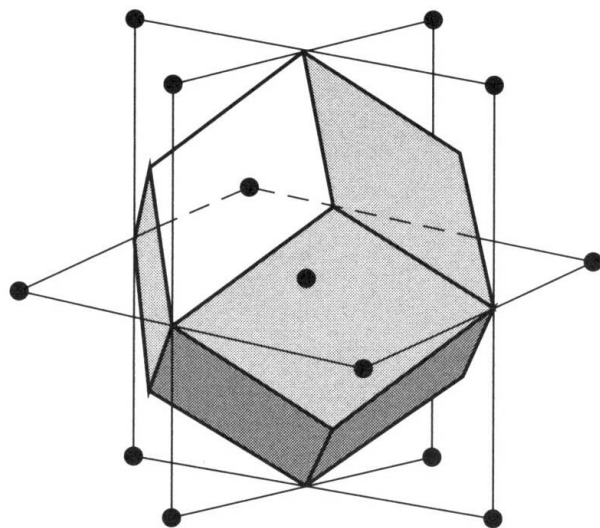


Abb. 3.2: Erste Brillouin-Zone des kubisch raumzentrierten Gitters, ein regelmäßiger rhombischer **Dodekaeder**

Wir überprüfen für das *bcc*-Gitter:

$$\begin{aligned}
 \vec{a}_1 &: \left(\frac{a}{2}, \frac{a}{2}, -\frac{a}{2}\right) = \frac{a}{2}(1, 1, -1) \\
 \vec{a}_2 &: \frac{a}{2}(-1, 1, 1) \\
 \vec{a}_3 &: \frac{a}{2}(1, -1, 1) \\
 V &= \left(\frac{a}{2}\right)^3 \\
 \vec{b}_1 &= \frac{2\pi}{V} [\vec{a}_2 \times \vec{a}_3] = \frac{4\pi}{a^3} \cdot \frac{a^2}{4} \cdot \begin{vmatrix} i & j & k \\ -1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 \end{vmatrix} \\
 &= \frac{\pi}{a} [i \cdot 2 + j \cdot 2 + k \cdot 0] = \frac{2\pi}{a}(1, 1, 0) \\
 \vec{b}_2 &= \begin{vmatrix} i & j & k \\ 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 \end{vmatrix} = i \cdot 0 + j \cdot 2 + k \cdot 2 \\
 &= \frac{2\pi}{a}(0, 1, 1) \\
 \vec{b}_3 &= \begin{vmatrix} i & j & k \\ 1 & 1 & -1 \\ -1 & 1 & 1 \end{vmatrix} = i \cdot 2 - j \cdot 0 + k \cdot 2 \\
 &= \frac{2\pi}{a}(1, 0, 1)
 \end{aligned}$$

Damit erhält man das *fcc* Gitter (**siehe hierzu Abb. ??? Auf Seite ???**)

Anmerkung.

$$\begin{aligned}
 (\text{reziprok})^2 &= ? \\
 \vec{c}_3 &= \frac{2\pi}{\vec{b}_1 \cdot \vec{b}_2 \times \vec{b}_3} \vec{b}_1 \times \vec{b}_2 \sim \vec{b}_1 \times \vec{b}_2 \sim [\vec{a}_2 \times \vec{a}_3] \times [\vec{a}_3 \times \vec{a}_1] \\
 &= \vec{a}_3 \cdot \underbrace{[\vec{a}_2 \cdot \vec{a}_3 \times \vec{a}_1]}_{=V_E} - \vec{a}_1 \left[\vec{a}_2 \cdot \underbrace{\vec{a}_3 \times \vec{a}_3}_{=0} \right] \sim \vec{a}_3 \\
 (\text{reziprok})^2 &= \text{Raumgitter!}
 \end{aligned}$$

Beispiel.

$$\vec{a}_1 \perp \vec{a}_2 \perp \vec{a}_3 \perp \vec{a}_1$$

3 Beugung von Wellen an Kristallen

⇒ (einfach, kubisch, tetragonal, orthorombisch)

$$\begin{aligned}
 V &= \vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 \cdot \vec{a}_3 \\
 \vec{b}_1 &= \frac{2\pi}{\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 \cdot \vec{a}_3} [\vec{a}_2 \times \vec{a}_3] \\
 \vec{b}_1 &= \frac{2\pi}{|\vec{a}_1|} \cdot \frac{\vec{a}_1}{|\vec{a}_1|}, \\
 \vec{b}_2 &= \frac{2\pi}{|\vec{a}_2|} \cdot \frac{\vec{a}_2}{|\vec{a}_2|}, \\
 \vec{b}_3 &= \frac{2\pi}{|\vec{a}_3|} \cdot \frac{\vec{a}_3}{|\vec{a}_3|} \\
 d_{hkl} &= \frac{2\pi}{\underbrace{|G_{hkl}|}_{\text{gilt immer}}} = \frac{2\pi}{\underbrace{\left| \left(\frac{2\pi}{\vec{a}_1}, \frac{2\pi}{\vec{a}_2}, \frac{2\pi}{\vec{a}_3} \right) \right|}_{\text{nur bei Rechtwinkligen Gitter}}} \\
 G &:(h, k, l) \\
 &= \frac{2\pi}{\sqrt{\left(\frac{2\pi}{\vec{a}_1} h \right)^2 + \left(\frac{2\pi}{\vec{a}_2} k \right)^2 + \left(\frac{2\pi}{\vec{a}_3} l \right)^2}} \\
 &= \frac{1}{\sqrt{\frac{h^2}{\vec{a}_1^2} + \frac{k^2}{\vec{a}_2^2} + \frac{l^2}{\vec{a}_3^2}}} \\
 &\stackrel{\text{nur f. kubische Gitter}}{=} \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}
 \end{aligned}$$

3.3 Strahlung für Materialuntersuchungen

Zur Materialanalyse verwendet man in der Regel die drei Strahlungstypen:

1. Röntgenstrahlung (X- Rays)

Die Wellenlänge der Röntgenstrahlung erhält man aus:

$$\lambda = \frac{12,4 \text{ \AA}}{E(KeV)} = \frac{hc}{E}.$$

Die Eindringtiefe beträgt $\sim 1mm$. Das Röntgenbild erhält man aus der Streuung an Elektronendichte.

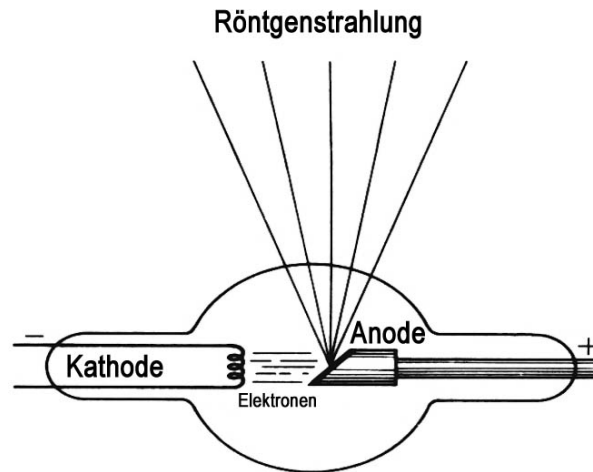
2. Neutronen:

Die Wellenlänge der Neutronen wird aus

$$\lambda_n = \frac{0,28 \text{ \AA}}{\sqrt{E_{kin}(eV)}} = \frac{\hbar}{p} = \frac{\hbar}{\sqrt{2mE_{kin}}}$$

berechnet. Das entspricht einer kinetischen Energie

$$E_{kin} = \frac{p^2}{2m}$$


Abb. 3.3: Aufbau einer **Röntgenröhre**

Die Eindringtiefe für die Neutronen ist etwa $\cong 1cm$. Damit kann man Schlüsse aus der Probe durch die Streuung an Kernen und an magnetischen Moment der Elektronenhülle ziehen.

3. **Elektronenwellen** Hier wären mehr Informationen hilfreich, allerdings stehen sie nicht in Ihrem Skript

$$\lambda_e = \frac{12 \text{ \AA}}{\sqrt{E_{kin}(eV)}}$$

$$E_{kin} \ll 0,5 \text{ MeV}$$

Die Eindringtiefe liegt bei dieser Strahlung etwa bei $\sim 10nm$, es ist also Oberflächensensitiv.

Erzeugung der Strahlen:

1. Röntgenröhre (siehe Abb. 3.3 auf Seite 33).

Elektronen werden erst mit einer großen Spannung U beschleunigt, anschließend werden sie beim Auftreffen auf die Anode wieder abgebremst. Dies führt zu einer Emission von **elektromagnetischer Strahlung**, der sogenannten **Röntgen Bremsstrahlung**. Typische Anodenmaterialien sind Kupfer (Cu), Wolfram (W), oder Molybdän (Mo). Diese liefern jeweils eigene charakteristische Strahlungen wie in Abb. 3.4 auf Seite 34 zu sehen.

20.05.08

2. Synchrotronstrahlung:

Diese wird erzeugt, indem man ein e^- auf einer Kreisbahn beschleunigt. Damit erhält man **ultrarelativistische Teilchen**, diese strahlen in Vorwärtsrichtung ab. Man erhält im nichtrelativistischen Bereich ($v \ll c$) ein kontinuierliches Spektrum.

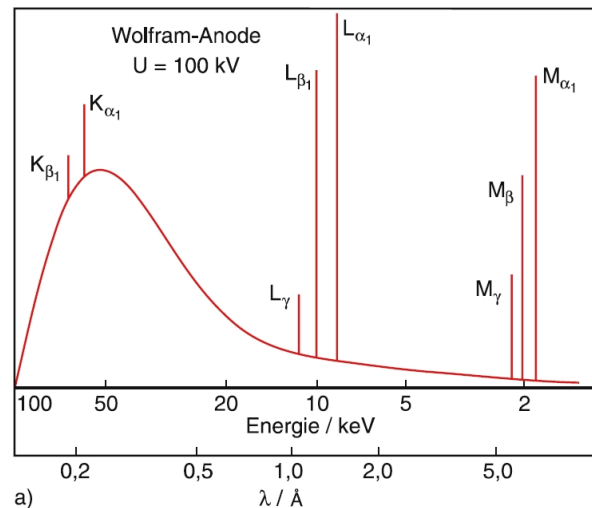


Abb. 3.4: Charakteristische Röntgenstrahlung

klassisch $\nu_{Typ} \sim \frac{v}{2\pi R} \sim \frac{2\pi a}{c}$

3. Neutronenstrahlung

Neutronenstrahlung wird folgendermaßen erzeugt:

In einem Reaktor befindet sich U^{235} und Deuterium. D_2O dient hier als Moderator, der die schnellen Neutronen aus der Spaltung auf ca. 300K abbremst. (sog. **thermische Neutronen**).

Die abgestrahlten Wellen haben eine Energie von $\sim 0,03eV$ und eine Wellenlänge von $\lambda \sim 1,5 \text{ \AA}$

4. Elektronenwellen

3.4 Streuung am dreidimensionalen Gitter

3.4.1 Bragg Formulierung

BRAGG nahm an, dass die Kristalle nur aus Ebenen bestehen, die nur schwach reflektieren ($\sim 10^{-5}$). Aufgrund der unterschiedlichen Wegstrecke, die die Strahlung zurücklegt kommt es entweder zu einer konstruktiven oder destruktiven Interferenz. Zu einer destruktiven Interferenz kommt es dann, wenn die **Bragg-Bedingung** erfüllt ist:

$$m\lambda = 2d_{hkl} \sin \alpha$$

Beweis. 1. Einfallswinkel = Ausfallswinkel

Skizze 32

$$\Delta l_1 = s \cos \alpha$$

$$\Delta l_2 = s \cos \beta$$

$$\Delta l = \Delta l_1 - \Delta l_2 = s(\cos \alpha - \cos \beta)$$

Für beliebiges s muss gelten:

$$\Delta l = k\lambda$$

$$s\text{-beliebig} \Rightarrow \boxed{\alpha = \beta}$$

2. **konstruktive Interferenz:** $2d \sin \alpha = n\lambda$ ($n_1 \sim 10^{-4}$) $\Leftarrow$ Was bedeutet das?
 Steht leider nicht im Skript.
 Skizze 33

□

3.4.1.1 Laue-Formulierung

Betrachten wir das allgemeine Streuproblem:

Skizze 34

für die E.M. Welle gilt als Phasenfaktor

$$e^{i\vartheta} = e^{i\vec{k}\vec{r}} \text{ mit } \vec{k}$$

$$= \frac{2\pi}{\lambda} \vec{e}_\lambda$$

Die Phasenunterschiede betragen links:

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

und rechts:

$$\frac{2\pi r \cos \alpha}{\lambda'} = \vec{k}' \cdot \vec{r}$$

Bemerkung. Die Amplitude der gestreuten Welle ist proportional zur **lokalen Elektronendichte** $n(\vec{r})$. Daher ist die Gesamtamplitude am Detektor $n(\vec{r})$ proportional zu:

$$F = \int_V dV \cdot n(\vec{r}) \cdot e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{r}}$$

der **Streuvektor** ist hierbei:

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

Zu beachten ist hier, dass wir eine periodische Funktion $n(\vec{r})$ vorliegen haben. Es gilt:

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

wobei $\vec{T}$ der **Translationsvektor** ist. Für ihn gilt:

$$\vec{T} = \alpha_1 \vec{a}_1 + \alpha_2 \vec{a}_2 + \alpha_3 \vec{a}_3.$$

3 Beugung von Wellen an Kristallen

Die Fourier-Analyse liefert:

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

$\vec{G}$ ist hier der reziproke Gittervektor

$$\vec{G} = \beta_1 \vec{b}_1 + \beta_2 \vec{b}_2 + \beta_3 \vec{b}_3$$

Skizze 34

27.05.08

Wir Überprüfen dies. (Es ist kein Beweis!!):

$$\begin{aligned} n(\vec{r} + \vec{T}) &= \sum_{\vec{G}} n_{\vec{G}} e^{i \overbrace{(\beta_1 \vec{b}_1 + \beta_2 \vec{b}_2 + \beta_3 \vec{b}_3)}^{\vec{G}} \cdot (\vec{r} + \alpha_1 \vec{a}_1 + \alpha_2 \vec{a}_2 + \alpha_3 \vec{a}_3)} \\ (a_i b_j &= 2\pi \delta_{ij}) \\ &= \sum_{\vec{G}} n_{\vec{G}} e^{2\pi(\alpha_1 \beta_1 + \alpha_2 \beta_2 + \alpha_3 \beta_3) + \vec{r} \cdot \vec{G}} \\ &= \sum_{\vec{G}} n_{\vec{G}} e^{i\vec{r} \cdot \vec{G}} \\ &= n(\vec{r}) \end{aligned}$$

Es gilt außerdem:

$$e^{2\pi i N} = 1$$

in F eingesetzt:

$$\begin{aligned} F &= \sum_{\vec{G}} n_{\vec{G}} \int_V dV \cdot e^{-i\Delta\vec{k} \cdot \vec{r}} \cdot e^{i\vec{G} \cdot \vec{r}} \\ &= \sum_{\vec{G}} n_{\vec{G}} \int_V dV \cdot e^{i(\vec{G} - \Delta\vec{k}) \cdot \vec{r}} \\ \vec{G} &= \Delta\vec{k} \quad F - \text{groß (Faktor } 10^{23}) \\ \vec{G} &\neq \Delta\vec{k} \quad F - \text{klein} \end{aligned}$$

$$\boxed{\Delta\vec{k} = \vec{G}} \leftrightarrow 2d \sin \alpha = n\lambda$$

Verwendet man eine etwas andere Schreibweise, so kann man die **elastische Streuung**, also die Streuung ohne Energieverluste betrachten

$$\begin{aligned} |\vec{k}| &= |\vec{k}'| \Rightarrow \vec{k}^2 = \vec{k}'^2 \\ \vec{k}' - \vec{k} &= \vec{G} \Rightarrow \vec{k}' = \vec{G} + \vec{k} \\ \vec{k}'^2 &= \vec{G}^2 + \vec{k}^2 + 2\vec{k} \cdot \vec{G} \Rightarrow \boxed{2\vec{k} \cdot \vec{G} + \vec{G}^2 = 0} \\ \vec{G} &\rightarrow -\vec{G} \Rightarrow \boxed{\vec{G}^2 = 2\vec{k} \cdot \vec{G}} \end{aligned}$$

Daraus folgen die **Laue Gleichungen**. Für diese erhielt MAX VON LAUE 1914 den Nobelpreis. Multipliziert man den $\vec{k}$ mit a_1, a_2, a_3 so erhält man:

$$\Delta\vec{k} = \vec{G} \begin{cases} \vec{a}_1 & \Rightarrow \Delta\vec{k}\vec{a}_1 = \beta_1 \cdot 2\pi \\ \vec{a}_2 & \Rightarrow \Delta\vec{k}\vec{a}_2 = \beta_2 \cdot 2\pi \\ \vec{a}_3 & \Rightarrow \Delta\vec{k}\vec{a}_3 = \beta_3 \cdot 2\pi \end{cases}$$

wobei:

$$\vec{G} = \beta_1 \vec{b}_1 + \beta_2 \vec{b}_2 + \beta_3 \vec{b}_3$$

Bemerkung. Eine bequeme Deutung der Beugungsbedingung ist die **Ewald-Konstruktion**. Dazu zeichnet man einen ebenen Schnitt des reziproken Gitters und lege den Vektor $\vec{k}$ mit der Spitze in einen reziproken Gitterpunkt P . Sein Anfang sei als „0“ definiert. Jeder andere Gitterpunkt, der auf dem Kreis um „0“ durch P liegt, ergibt die Richtung eines **möglichen** Reflexes, nämlich einen Wellenvektor $\vec{k}'$ der die Beugungsbedingung erfüllt. (nach Gerthsen Physik, 23. Auflage, S. 893)

$$\frac{2\pi}{\lambda} = |\vec{k}| \quad (3.1)$$

Skizze 35 $\Delta k = G$ (seltene Bedingung)

1. Zufall
2. Drehung des Kristalls
3. Veränderung der Wellenlänge

3.5 Fourier-Analyse der Basis

Bisher haben wir nur Gitterrandpunkte betrachtet. Ein Gegenbeispiel ist das *bcc* Gitter $(0, 1, 0)$ (Abb. 2.6 auf Seite 17). Man kann es sich auch etwa so vorstellen, dass es in der Zelle, die von den Basisvektoren aufgespannt wird ein weiterer Punkt existiert, der in Verbindung mit den Punkten in den parallelverschobenen Zellen eine neue Ebene aufspannt, an der das Licht mit einer Phasenverschiebung von $\Delta\varphi = \pi$ reflektiert wird, sodass eine destruktive Interferenz auftritt und somit die Gesamtintensität null wird.

Skizze 39 und 40

Streuamplitude: Für festen Wert $\vec{G}(\beta_1, \beta_2, \beta_3)$, wobei $(\vec{G} = \Delta\vec{k})$, $(2d_{hkl} \sin \varphi = n\lambda)$ und für festes $\Delta\vec{k}$ gilt:

$$\begin{aligned} F_{\vec{G}} &= \int^{\text{Kristall}} dV \, n(\vec{r}) e^{-i\vec{G}\vec{r}} = \left| \begin{array}{l} \text{alle Zellen} \\ \text{sind gleich} \end{array} \right| \\ &= N \cdot \underbrace{\int dV \, n(\vec{r}) e^{i\vec{G}\vec{r}}}_{\text{Zelle}} = N \cdot S_{\vec{G}} \end{aligned}$$

mit N als Anzahl der Zellen und $S_{\vec{G}}$ als **Strukturfaktor**.

3 Beugung von Wellen an Kristallen

Annahme: die Atome sind punktförmig, deswegen gilt:

$$\begin{aligned} n(\vec{r}) &= \sum_{(\text{Zelle})} \nu_i \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) \\ S_{\vec{G}} &= \int dV e^{-i\vec{G}\vec{r}} \sum_i \nu_i \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) \\ &= \sum_i q_i \underbrace{\int dV e^{-i\vec{G}\vec{r}} \delta(\vec{r} - \vec{r}_i)}_{e^{-i\vec{G}\vec{r}_i}} \\ &= \boxed{\sum_i \nu_i e^{-i\vec{G}\vec{r}_i}} \end{aligned}$$

folgt aus dem Zwischenwertsatz der Integralrechnung, wir erinnern uns:

$$\int f(x) \delta(x - x_i) = f(x_i)$$

Damit erhalten wir insgesamt die gebräuchliche Form des Strukturfaktors:

$$\begin{aligned} \vec{G}(\beta_1, \beta_2, \beta_3) &= \beta_1 \vec{b}_1 + \beta_2 \vec{b}_2 + \beta_3 \vec{b}_3 \\ \vec{r}_i(x_i, y_i, z_i) &= x_i \vec{a}_1 + y_i \vec{a}_2 + z_i \vec{a}_3 \\ \vec{G}\vec{r}_i &= 2\pi(\beta_1 x_i + \beta_2 y_i + \beta_3 z_i) \end{aligned}$$

Skizze 41

$$S_{\vec{G}}(\beta_1, \beta_2, \beta_3) = \sum_i q_i e^{-i2\pi(\beta_1 x_i + \beta_2 y_i + \beta_3 z_i)}$$

Betrachten wir als **Beispiel** das *bcc* Gitter mit der Basis $\begin{pmatrix} 0, 0, 0 \\ \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \end{pmatrix}$ mit $q_1 = q_2 = f$

$$S_{\vec{G}} = f [1 + e^{-\pi i(\beta_1 + \beta_2 + \beta_3)}]$$

Wir betrachten Reflexe für für 1 0 0 und 1 1 0, für $S_{1\ 0\ 0}$ gibt es kein Signal. Hingegen bei $S_{1\ 1\ 0} = 2f$ wird die doppelte Amplitude erwartet.

28.05.08

Bemerkung. Wobei **Kaliumchlorid** und **Kaliumbromid** eine *fcc* Struktur besitzen. Elektronisch gesehen ist $K^+ = [Ar]$ und $Cl^- = [Ar]$.

Skizze 43

Geht man über zu einer nichtpunktförmigen Betrachtung der Atome, so muss man $q_i \Leftrightarrow f_i$ ersetzen, wobei f_i der **Atomformfaktor** ist. in dieser speziellen Betrachtung ist

$$f_i = \int_{\text{Zelle}} dV n(r - r_i) \cdot e^{-iG(r - r_i)}$$

Zusammenfassend kann man schreiben:

$$\text{Streuung} = \text{Beugungsbedingung (Gitter)} \times \text{Strukturfaktor (Basis)} \times \text{Atomformfaktor}$$

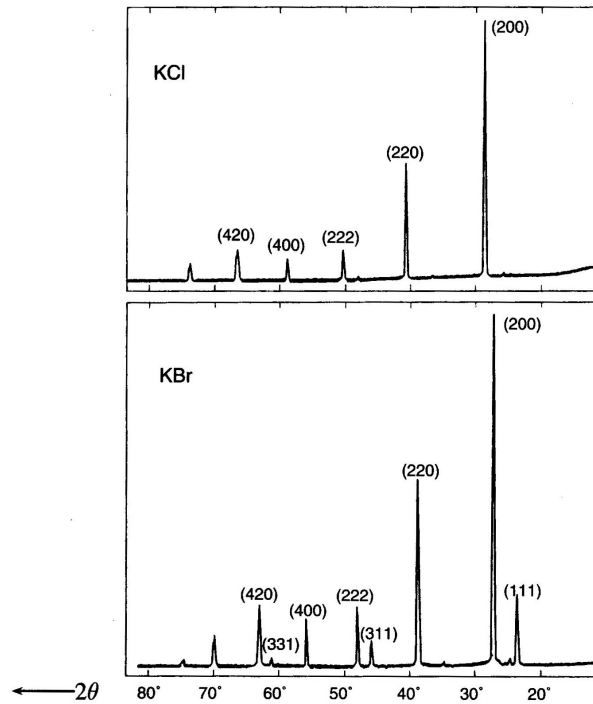


Abb. 3.5: Vergleiche die Röntgenreflexe von KCl - und KBr -Pulver. Im KCl ist die Elektronenzahl der Ionen K^+ und Cl^- gleich. Die Streuamplituden $f(K^+)$ und $f(Cl^-)$ sind deshalb fast identisch, sodass der Kristall für Röntgenstrahlung wie ein einatomiges, einfach kubisches (sc) mit der Gitterkonstante $a/2$ erscheint. Bei den Reflexen erscheinen nur die geradzahigen Indizes, bezogen auf ein kubisches Gitter mit der Gitterkonstante a . Im KBr sind die Formfaktoren von K^+ und Br^- sehr verschieden, sodass für alle Reflexe des fcc Gitters auftreten. (Mit freundlicher Genehmigung von Robert van Nordstrand)

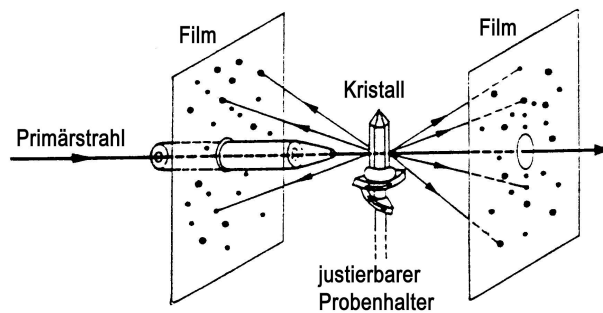


Abb. 3.6: Aufbau und Analyseprinzip nach LAUE

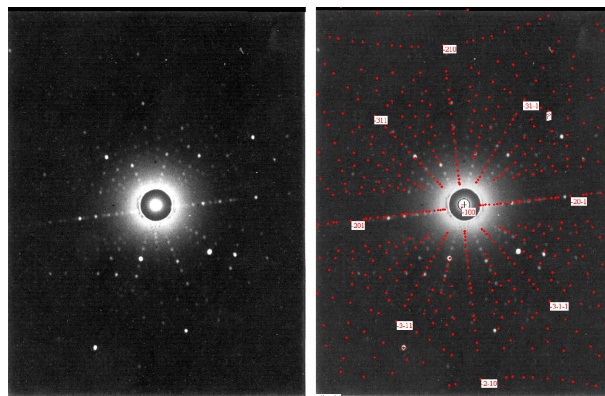


Abb. 3.7: Laue-Bild eines $LaMnO_3$ -Einkristalls

3.6 Experimentelle Methoden

Laue Verfahren

Bei diesem Verfahren wird nicht nur ein kleiner Bereich auf Interferenz untersucht sondern mittels der beiden gegenüberliegenden strahlungsempfindlichen Filmschichten in mehr Raumrichtungen die Interferenz- und Beugungsbilder untersucht. Betrachten wir Abb. 3.6 auf Seite 40. Es wird hier ein Primärstrahl (zum Beispiel **Synchrotronstrahlung** oder die Röntgen Bremsstrahlung) auf die Probe (den Kristall) geschickt. Mit dem justierbaren Probenhalter können so die verschiedenen Beugungs- und Interferenzmuster erhalten und daraus Rückschlüsse auf die Struktur der Probe/des Kristalls gezogen werden. Ein typisches Laue-Bild ist das vom $LaMnO_3$ -**Einkristall** in Abb. 3.7 auf Seite 40 dargestellt.

Debye-Scherrer Verfahren

Das **Debye-Scherer-Verfahren** wird angewandt, wenn statt eines großen Einkristalls die Probe nur in Mikrokristallen in Pulverform vorliegt, die kleiner als der Durchmesser des Röntgenstrahls sind. Es wird hierbei monochromatische Röntgenstrahlung verwendet. Das durch Interferenz und Beugung entstehende Bild wird auf einen gebogenen Film aufgezeichnet (siehe Abb. 3.8 a) und b) auf Seite 41). Das typische Bild aus Abb. 3.8 b) entsteh dabei durch die wenigen Mikrokristallen erzeugt, deren Gitterebene gerade zufäl-

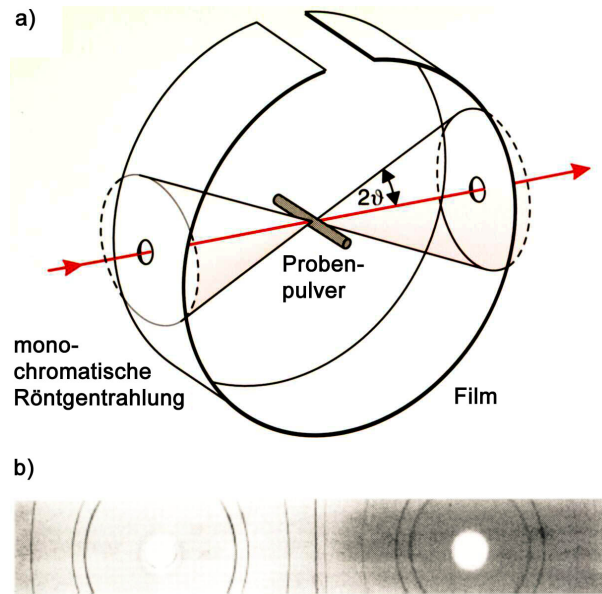


Abb. 3.8: Debye-Scherer-Verfahren. In a) ist die experimentelle Anordnung dargestellt. b) zeigt die Aufnahme der ringförmigen Interferenzmaxima von Kupferpulver. Aus H. RAETHER **elektroneninterferenzen** in *Handbuch der Physik* Band 32. (1957)

lig im passenden Winkel θ zum einfallenden Röntgenlicht steht. Damit erfüllen diese die Bragg Bedingung (3.1). Für die Richtungen 2θ findet konstruktive Interferenz statt, sodass also die Interferenzringe um die Achse des einfallenden Röntgenstrahls herausbilden (Abb. 3.8 b)). Um diese alle zu erfassen ist es notwendig, den Film kreisförmig um die Probe herum anzuordnen (wie in der Abb. 3.8 in a) dargestellt).

4 Dynamik von Kristallgittern

4.1 Einleitung

Bemerkung. Schwingungen werden durch die thermische Energie immer angeregt. Bei N -Atomen gibt es $3N$ Freiheitsgrade (in alle drei Raumrichtungen). Die Energie ist dabei klassisch betrachtet $\approx 3N \frac{1}{2} k_B T$

Annahme: Zur verdeutlichung der Wechselwirkung der Atome im Gitter untereinander nehmen wir an, dass die Atome mit Federn verbunden sind.

1 Dimensional Potentielle Energie

$$U(x) = \cancel{U_0^0} + \cancel{U'(x-x_0)^0} + \frac{1}{2!} U''(x-x_0)^2 + \underbrace{\frac{1}{3!} U'''(x-x_0)^3}_{\text{bei kleinen Auslenkungen}=0} + \dots$$

Die Energie ist relativ. Die Gleichgewichtslage ist $U' = 0$ und da die Auslenkung klein ist, sind die höheren Terme vernachlässigbar, das heißt wir vernachlässigen also alle Exponenten $p \geq 3$ und betrachten also

$$U(x) = \frac{1}{2} c x^2$$

3 Dimensional Im 3 dimensionalen Raum ist die Bewegung der Netzebenen analog zu der Bewegung der linearen Kette. Wir erhalten drei Freiheitsgrade und drei Bewegungsgleichungen pro Atom und damit auch drei Lösungen pro Atom. Eine Lösung (=Schwingung) ist **longitudinal** und zwei sind **transversal**.

Skizze 45

4.2 1 – Atomare lineare Kette

Skizze 46

Wir stellen uns eine Kette von drei Atomen vor. Das erste Atom wird um eine Strecke U_{S-1} in Richtung des 2. Atomes verschoben. Dieses lenkt sich um die Strecke U_S aus und wirkt damit auf das dritte Atom dieser Kette. Als Reaktion auf die Auslenkung der ersten beiden Atome wird das dritte Atom ebenfalls ausgelenkt, allerdings nur um den Faktor U_{S+1} , wobei (ohne weitere äußere Einwirkungen) gilt: $|U_{S-1}| < |U_S| < |U_{S+1}|$

Annahme: Es findet nur eine **Wechselwirkung** zwischen den **nächsten Nachbarn** statt. Auf das Atom S wirkt die Kraft F_S mit

$$F_S = c(U_{S-1} - U_S) + c(U_{S+1} - U_S)$$

Damit erhalten wir die Bewegungsgleichung für das Atom S :

$$M \frac{d^2 U_S}{dt^2} = c(U_{S+1} + U_{S-1} - 2U_S)$$

mit dem harmonischen Ansatz $U_i(t) = v_i e^{i\omega t}$ wird die Gleichung:

$$-M\omega^2 v_S = c(v_{S+1} + v_{S-1} - 2v_S)$$

Die Lösung wird als laufende Welle gesucht mit

$$\begin{aligned} U_S &= v_S e^{-i\omega t} \\ U_{S+1} &= v_S e^{i\omega t} e^{iqa} \\ U_{S-1} &= v_S e^{i\omega t} e^{-iqa} \end{aligned}$$

wobei $q = \frac{2\pi}{\lambda}$ der Wellenvektor und λ die Wellenlänge sowie a der Abstand der benachbarten Atome ist.

$$\begin{aligned} -M\omega^2 v_S &= c^2 \cdot v_S (e^{iqa} + e^{-iqa} - 2) \\ -M\omega^2 &= 2c(\cos(qa) - 1) = 2c - 2\sin^2 \frac{qa}{2}, \end{aligned}$$

da $\cos \alpha = \cos^2 \frac{\alpha}{2} - \sin^2 \frac{\alpha}{2}$ ist, ergibt sich für ω :

$$\omega = \sqrt{\frac{4c}{M}} \cdot \left| \sin \frac{qa}{2} \right|$$

Experimentell kann man feststellen, dass Schwingungen diskrete Energien $\Delta E = \hbar\omega$ annehmen. Der Impuls beträgt:

$$p = \hbar q = \frac{2\pi}{\lambda} \hbar$$

Teilchen mit dieser Energie nennt man auch **Phononen**. Trägt man die Energie und den Impuls graphisch auf, so erhält man eine Symmetrische Kurve mit Maxima bei $\pm \frac{\pi}{a}$ und Nullstelle bei 0 und $\pm \frac{2\pi}{a}$. Das Intervall zwischen $-\frac{\pi}{a}$ und $+\frac{\pi}{a}$ ist die erste **Brillouin-Zone** (kurz: **BZ**) der eindimensionalen Kette. Die Energie berechnet sich dann aus

$$\begin{aligned} E_{kin} &= \frac{p^2}{2m} \\ \hbar\omega &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \end{aligned}$$

Die Dispersionsrelation ist dabei $\Omega(q)$, $\omega(k)$.

Dies gilt allerdings für Elektronen, Neutronen usw., allerdings gilt es **nicht** für Phononen. Für Phononen gilt:

$$\begin{aligned} E &= \hbar \cdot \omega \\ p &= \hbar \cdot \nu \end{aligned}$$

4.2.1 Die erste Brillouin-Zone

Skizze 49

Wir stellen uns eine schwingende atomare Kette vor, in denen die Atome bereits in einer Kurve ausgelenkt sind. Durch die Atome selbst geht eine weitere Kurve, die die aktuellen Positionen der der Atome verbindet. Der Abstand benachbarter Atome sei wieder a . Wegen des diskreten Charakters des Kristalls übermitteln beide Kurven **gleiche Informationen**. Man bezeichnet diese auch als **physikalisch äquivalent**

03.06.08

Die Phase (q, a) im Bereich $-\pi < q, a \leq \pi$ umfasst alle physikalisch relevanten Werte.

$$-\frac{\pi}{a} \leq q \leq \frac{\pi}{a}, \quad |q_{max}| = \frac{\pi}{a}$$

- für das klassische Kontinuum gilt: $a \rightarrow 0 \Rightarrow q_{max} \rightarrow \infty$
- außerhalb der Grenzen hingegen ist: $q' \equiv q - \frac{2\pi}{a} \cdot n$ ($n \in \mathbb{N}$)
das heißt, q liegt in der ersten Brillouin Zone.

4.2.2 Gruppengeschwindigkeit

Bemerkung. Beim betrachten eines Wellenpaketes fällt insbesondere auf, dass man es durch zwei Geschwindigkeiten beschreiben kann. Einerseits durch die **Phasengeschwindigkeit** und die **Gruppengeschwindigkeit**. Die Phasengeschwindigkeit ist die Geschwindigkeit der Welle im Paket selbst. Die Gruppengeschwindigkeit ist die Geschwindigkeit des gesamten Wellenpaketes und ist verantwortlich für die Übertragung der Energie und der Information. Die Phasengeschwindigkeit kann schneller als die Lichtgeschwindigkeit sein, die Gruppengeschwindigkeit ist es im normalfall nicht.

- Betrachten wir zuerst die **Phasengeschwindigkeit**. Sie ist beschrieben durch:

$e^{i(\omega t - \overbrace{qx}^{sa})}$ was zu $\cos(\omega t - qx)$ führt. Damit ist:

$$\omega t_0 - q x_0 = \text{const} (\text{max} : \text{const} = 0, 2\pi, \dots)$$

$$\omega t_0 = \text{const} + q x_0$$

$$\omega = q \frac{dx_0}{dt_0}$$

Die **Phasengeschwindigkeit** ist

$$\Rightarrow v_{ph} = \frac{dx_0}{dt_0} = \frac{\omega}{q}$$

- und für die **Gruppengeschwindigkeit** gilt dann aus der **Dispersionsrelation** $\frac{\omega}{q}$:

$$v_G = \frac{d\omega}{dq}$$

(Herleitung siehe z.B. DERMTRÖDER Kapitel 3.3.1)

Wobei die **Gruppengeschwindigkeit** die Geschwindigkeit der **einhiillenden Welle** ist, die **Phasengeschwindigkeit** die **Geschwindigkeit der Wellen innerhalb des Paketes** bezeichnet.

3 Dimensional betrachtet:

$$\begin{aligned} v_G &= \text{grad}_q(\omega(q)) = \nabla_q \omega(q) \\ &= \left(\frac{\partial \omega}{\partial q_x}, \frac{\partial \omega}{\partial q_y}, \frac{\partial \omega}{\partial q_z} \right) \\ \Rightarrow v_G &= \sqrt{\frac{ca^2}{M}} \cdot \cos\left(\frac{1}{2} \cdot qa\right) \end{aligned}$$

Für $q \cdot a = \pm\pi$ erhalten wir eine stehende Welle mit $v_G = 0$

Langwelliger Grenzfall, $qa \ll 1$

$$\begin{aligned} \sin \frac{1}{2}qa &\approx \frac{1}{2}qa \\ \Rightarrow \omega^2 &= \frac{c}{M} q^2 a^2 \\ \Rightarrow \omega &= \sqrt{\frac{c}{M}} qa \\ \frac{\omega}{q} &= \frac{d\omega}{dq} = v_G = v_{Ph} \end{aligned}$$

(wie im Kontinuum)

4.3 Zweiatomare lineare Kette

Bildlich kann man es sich so vorstellen, dass man, wie bei Kochsalz (Abb. 4.1 auf Seite 46) abwechselnd eine großes und eine kleines Atom aufgereiht hat.

Äquivalent ist zum Beispiel die $[1, 1, 1]$ -Richtung von $NaCl$ (ist $\perp$ zur $(1,1,1)$ -Ebene)

$$\begin{cases} M\ddot{u}_s &= C(v_{s-1} + v_s - 2u_s) \\ m\ddot{v}_s &= C(u_s + u_{s+1} - 2v_s) \end{cases}$$

Lösung analog in 1-Atomigen Kette, verschiedene Amplituden

$$\begin{aligned} u_s &= ue^{i\omega t} \\ v_s &= v \cdot e^{-i\omega t} \\ u_{s\pm 1} &= u \cdot e^{-i\omega t} \cdot e^{\pm iqa} \\ v_{s\pm 1} &= v \cdot e^{-i\omega t} \cdot e^{\pm iqa} \\ -M\omega^2 u &= c(v \cdot e^{-iqa} + v - 2u) \\ -m\omega^2 v &= c(u + u \cdot e^{iqa} - 2v) \end{aligned}$$

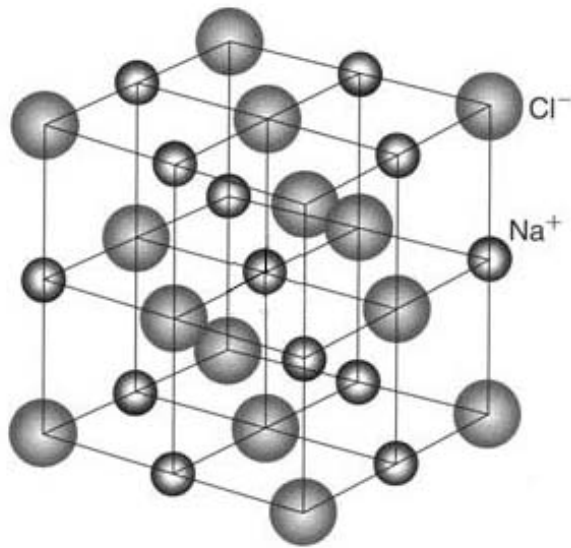


Abb. 4.1: Strukturbild eines $NaCl$ Salzkristalls (siehe auch 2.9 auf Seite 21)

oder in Matrixform:

$$\begin{pmatrix} (2c - M\omega^2) & -c(1 + e^{-iqa}) \\ -c(1 + e^{iqa}) & 2c - m\omega^2 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = 0$$

1. (triviale) Lösung: $u = v = 0$, das heißt, es schwingt überhaupt nichts!
2. (nichttriviale) Lösung: $\det = 0$

$$\begin{aligned} (2c - M\omega^2) \cdot (2c - m\omega^2) - c^2(1 + e^{iqa}) \cdot (1 + e^{-iqa}) &= 0 \\ 4c^2 + Mm\omega^4 - 2c\omega^2(M + m) - 2c^2(1 + \cos(qa)) &= 0 \end{aligned}$$

Lösung: $\omega(q) = 1 + 1 + e^{iqa} + e^{-iqa}$

Betrachten wir folgende Grenzfälle: $qa \ll 1$, das heißt: $\cos(qa) = 1 - \frac{(qa)^2}{2}$

1. $qa \ll \omega^2$, $qa \sim 0$

$$\begin{aligned} \omega^2 [\omega^2 Mm - 2c(M + m)] &= 0 \\ \Rightarrow \omega_1 &= 0 \\ \Rightarrow \omega_2^2 &= \frac{2c(M + m)}{m \cdot M} \\ &= \frac{2c}{m_{red}} \end{aligned}$$

2.a $\omega = 0, 1 - \cos(qa) = 0 \Rightarrow q = 0$

$$\begin{aligned} \omega &\approx 0 & (\omega^2 \gg \omega^4) \\ -2c\omega^2(M+m) + c^2(qa)^2 &= 0 \end{aligned}$$

2.b

$$\omega^2 = \frac{c}{2(M+m)}(qa)^2$$

Skizze $\Omega - q$ -Diagram

Dabei treten für $q = 0$ folgende zwei Fälle auf:

1. **optischer Ast** für $\omega = \sqrt{\frac{2c}{m_{red}}}$

das heißt, die Atome schwingen gegeneinander und bei ungleicher Ladung gilt:

- es gibt ein schwingendes Dipolmoment und
- es treten Wechselwirkungen mit Licht (Optik) auf

2. **akustischer Ast** für $\omega = 0$

das heißt, die Atome schwingen (fast) in Phase und sie verhalten sich wie bei akustischen Schwingungen

der anderer Grenzfall: $qa = \pi \Rightarrow 1 + \cos(qa) = 0$

$$\begin{aligned} (2c - M\omega^2) \cdot (2c - m\omega^2) &= 0 \\ \omega_1^2 &= \frac{2c}{M} \end{aligned}$$

bzw.:

$$\omega_2^2 = \frac{2c}{m}$$

10.06.08

Skizze 1 vom 10.06.08

Definition. Phononen sind quantenmechanische harmonische Schwingungen die durch ihre Energie

$$E = \left(N + \frac{1}{2}\right) \hbar\Omega$$

4 Dynamik von Kristallgittern

beschrieben werden. Ein Teilchen kann beim Schwingen nur diskrete Energieniveaus annehmen. Genauer gesagt weist die Quantenmechanik nach, dass Teilchen nur vom Nachbarniveau zu Nachbarniveau springen können. Die Energie die es dabei abgibt ist durch

$$\Delta E = \hbar\Omega$$

bestimmbar. Es treten für die Sprünge zwischen den Niveaus nur **Absorption**, **Emission** und **Streuung** auf.

$$\Delta E = \pm \hbar\Omega$$

Skizze 2 vom 10.06.08

Bemerkung. Impuls eines Phonons:

Physikalisch gesehen besitzt eine harmonische Schwingung keinen Impuls, aber die Experimente zeigen:

$$\vec{p}_{ph} = \hbar\vec{q}$$

Beispiel. Wir betrachten die Streuung von Photonen an Phononen.

Skizze 3 vom 10.06.08

Wir übertragen die Schwingungen gedanklich auf ein Gitter. Die Streuung an diesem Gitter ist dann $\Delta\vec{k} = \vec{G}$

$$\begin{aligned}\vec{G}_1 &= \frac{2\pi}{\lambda} = \vec{q} \\ \vec{k}' - \vec{k} &= \vec{q} \\ \hbar\vec{k}' &= \hbar\vec{q} + \hbar\vec{k},\end{aligned}$$

wobei $\hbar\vec{q}$ hier wie ein Impuls auftritt.

- 1. Fall** Zum Photon $\vec{k}$ kam ein Phonon hinzu. Das Photon wird nun in die Richtung $\vec{k}'$ gestreut
 $\Rightarrow \hbar q$ beschreibt den **Impuls eines Phonons**
- 2. Fall** Aus $\vec{k}$ löst sich ein Phonon heraus. Dann bewegt sich das Teilchen in Richtung $\vec{k}'$. Es ist also, dank der Vektoraddition primär egal, ob ein Phonon hinzukommt oder sich herauslöst. An der Formel ändert sich nichts.
Es gelten die **allgemeinen Erhaltungssätze**:

$$\vec{k}' = \vec{k} + \vec{G} \pm \vec{q}$$

Dabei ist $\vec{q}$ das Phonon, das entweder absorbiert oder emittiert wird. $\vec{G}$ ist der Einfluss vom Gitter. Für die Energie gilt daher:

$$E' = E \pm \hbar\Omega$$

Das Gitter verursacht **keine** Energieänderung! Es gibt eine kleine relative effektive Energieänderung durch den Kristall. Diese wird beschrieben mit

$$\Delta E_{\text{eff. Kristall}}^{\text{relativ}} \sim \frac{m_{\text{Teilchen}}}{M_{\text{Kristall}}} \ll 1$$



Abb. 4.2: Neutronenstreuspektrometer AGNES in Tokyo

4.4 p -Atome in der primitiven Zelle

- $3p$ Gleichungen (im 3 dimensionalen Raum)
- $3p$ Lösungen ($\Omega(q)$) $\Leftrightarrow$ Phononenäste
 1. 3 akustische Äste $\Leftrightarrow$ äquivalent zum Grenzfall „Kontinuum“. Sie spalten sich auf in eine longitudinale und 2 transversale Teile.
 2. $3p - 3$ optische Äste

Bemerkung. Bei der Verwendung nichtprimitiver Zellen erhalten wir beispielsweise doppelte Zellen die doppelte Anzahl von Lösungen. Allerdings sind diese paarweise äquivalent.

4.5 Experimenteller Nachweis durch Neutronenstreuung

Technisch umgesetzt und nachgewiesen wird der Impuls eines Phonons mit AGNES in Tokyo. Hierbei werden die Neutronen ähnlich wie Photonen gestreut. Es gilt:

$$m\vec{v}_0 = m\vec{v}_1 + \hbar\vec{G} \pm q$$

$$\frac{m}{2}\vec{v}_0^2 = \frac{m\vec{v}_1^2}{2} + \hbar\Omega$$

Daraus lässt sich $\Omega(q)$ bestimmen.

Siehe hier die Abb. 4.2 (Seite 49), Abb. 4.3 (Seite 50) und Abb. 4.4 (Seite 50).

4.6 Thermische Eigenschaften von Phononen

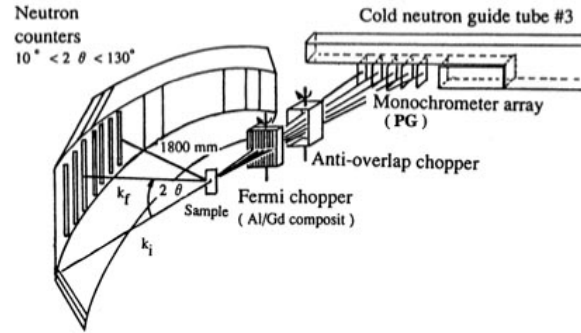


Abb. 4.3: Messmethode von AGNES

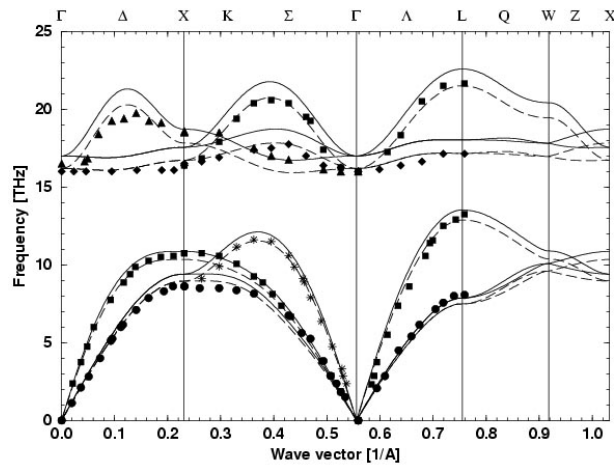


Abb. 4.4: Phononendispersionen in **TiC** gemessen mittels Neutronenstreuung

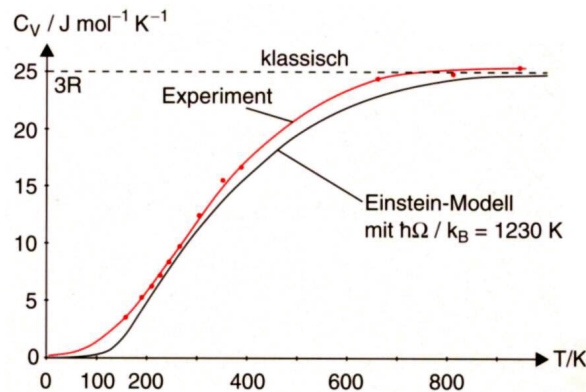


Abb. 4.5: Verlauf der spezifischen Wärme $C_v(T)$. Vergleich von **klassischem** und **Einstein-Modell** mit experimentellen erten für Diamanten

4.6.1 Einleitung

Fassen wir die wichtigsten Eigenschaften für die Betrachtung thermischer Eigenschaften noch einmal kurz zusammen:

1. die spezifische Wärme ist definiert durch $C_v = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_{v=\text{const}}$
2. klassisch betrachtet haben N - Atome $3N$ - Schwingungsrichtungen (im 3-dimensionalen Raum).

$$\begin{aligned}
 U &= k_B \frac{T}{\text{Schwingung}} \\
 &= \frac{1}{2} k_B T (\text{kin}) + \frac{1}{2} k_B T (\text{pot}) \\
 U &= 3N k_B T \\
 c_V &= 3N k_B
 \end{aligned}$$

Im Jahre 1819 wurde das **Dulong-Petit'sche Gesetz** aufgestellt und experimentell für $T \gtrsim 300K$ bestätigt. Bei tieferen Temperaturen ist $c_V \sim T^3$ Gesetz zu beobachten.

4.6.2 Einsteinsche Modell der spezifischen Wärme

Annahme: Die Energie ist äquivalent Schwingung der Frequenz Ω . Wir betrachten die Gesamtenergie der Schwingungen, dies ist die Summe der Elementarschwingungen. Wir betrachten im Potentialtopf das Niveau n , die p_n Schwingungen enthält. Die Energie auf dem n -ten Niveau E_n ist dann bestimmt über

$$E_n = \hbar \Omega \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

Die Gesamtenergie ist dann

$$E_{\text{ges}} = \sum_{n=0}^{\infty} p_n \cdot \hbar \Omega \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

1. im **thermischen Gleichgewicht** gilt die **Boltzmann-Verteilung**:

$$\frac{p_{n+1}}{p_n} = e^{-\frac{\Delta E}{kT}} = e^{-\frac{\hbar\Omega}{kT}}$$

Insgesamt gibt es $3N$ -Schwingungen und damit gilt:

$$\begin{aligned} 3N &= \sum_{n=0}^{\infty} p_n = \sum p_0 (x)^n = p_0(1 + x + (x)^2 + (x)^3 + \dots) \\ &= \frac{p_0}{1-x} \\ \Rightarrow p_0 &= 3N(1-x) \end{aligned}$$

Für die Energie U folgt demnach

$$\begin{aligned} U &= \sum p_0 (x)^n \cdot \hbar\Omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \\ &= \sum p_0 (x)^n \cdot n\hbar\Omega + \underbrace{\sum p_0 (x)^n}_{=3N} \frac{\hbar\Omega}{2} \end{aligned}$$

2. **Nullpunktenergie** (für C_v unwichtig) $3N \frac{\hbar\Omega}{2}$

3.

$$\begin{aligned} U_1 &= p_0 \hbar\Omega \sum n (x)^n \\ \frac{d}{dx} \left(\frac{1}{1-x} \right) &= \frac{d}{dx} (n \cdot x^n) \\ &= \sum n \cdot x^{n-1} = \frac{\sum n \cdot x^n}{x} \\ \frac{1}{(1-x)^2} &\Rightarrow \sum n x^n = \frac{x}{(1-x)^2} \\ U &= \hbar\Omega 3N (1-x) \cdot \frac{x}{(1-x)^2} = \hbar\Omega 3N \frac{1}{\frac{1}{x} - 1} \\ \Rightarrow &\boxed{U = 3N \hbar\Omega \frac{1}{e^{\frac{\hbar\Omega}{kT}} - 1}} \end{aligned}$$

Für die mittlere **Besetzungszahl** $\langle n \rangle$ gilt:

$$\begin{aligned} \langle n \rangle &= \frac{1}{e^{\frac{\hbar\Omega}{kT}} - 1} \\ C_v &= \frac{\partial U}{\partial T} \end{aligned}$$

die sog. **Planks-Verteilung**

Skizze 1 vom 11.06.08

a) $kT \gg \hbar\Omega$

$$e^{\frac{\hbar\Omega}{kT}} \approx \frac{\hbar\Omega}{kT} + 1$$

$$U = 3NkT \rightarrow c_V = 3Nk_B \quad (\text{klassisch})$$

b) $kT \ll \hbar\Omega \Rightarrow e^{\frac{\hbar\Omega}{kT}} \gg 1$

$$U = 3N\hbar\Omega e^{-\frac{\hbar\Omega}{kT}} \rightarrow 0$$

$$c_V = \left(\frac{\hbar\Omega}{kT}\right)^2 3Nk_B e^{-\frac{\hbar\Omega}{kT}}$$

Experimentell erhält man $\sim T^3$

4.6.3 Debye-Modell der spezifischen Wärme

Bemerkung. Wir betrachten nicht mehr nur eine Frequenz, sondern jetzt Schwingungen mehrere Frequenzen. Der Übergang sieht also wie folgt aus:

eine Schwingung $\rightarrow$ mehrere Schwingungen

$$U = 3N\hbar\Omega \langle n \rangle \rightarrow \sum \hbar\Omega_k \langle n_k \rangle$$

$$= \sum \frac{\hbar\Omega_k}{e^{\frac{\hbar\Omega_k}{kT}} - 1} \rightarrow \int \frac{\hbar\Omega}{e^{\frac{\hbar\Omega_k}{kT}} - 1} d\Omega \cdot D(\Omega)$$

Wobei $D(\Omega)$ die Dichte der Frequenzen ist. Anders ausgedrückt ist es die Anzahl der Schwingungen pro Frequenzintervall. In der Fachsprache wird dies auch als **Zustandsdichte** bezeichnet.

Wir betrachten wieder unsere Kette mit N Atomen im eindimensionalen. $L = a(N - 1)$ mit a als Abstand zweier benachbarter Atome. Um den Sachverhalt besser zu verstehen nehmen wir an, dass die Enden festgehalten werden. Diese Randbedingung spielt für den Übergang $N \rightarrow \infty$ keine wesentliche Rolle. Beschreibe $q_1 = \frac{L}{2\pi}$ den ersten Schwingungsfall, also den Fall, dass nur ein Bauch zwischen den Enden vorhanden ist. Dann beschreibt $q_2 = \frac{2L}{2\pi}$ den Fall, dass zwischen den Enden genau eine ganze Welle „passt“. Allgemein ist also $q_n = \frac{nL}{2\pi}$. Betrachten wir als **Beispiel** eine Kette mit 6 Atomen. Dann ist bei q_5 das Maximum $q_{\max}$ erreicht, da jedes Atom auf der Kurve liegt. Es gilt:

$$q_5 \rightarrow q_{\max}$$

$$\Omega_{\max} = \Omega_0$$

$$q_{\max} = (N - 1)$$

$$q = \frac{(n - 1)\pi}{L} = \frac{\pi}{a}$$

$q_{\max}$ liegt am Rande der Brillouinzone.

Eigenschaften bzw. Freiheitsgrade:

- Eindimensional: 1 Schwingung pro Atom
- Dreidimensional: 3 Schwingungen pro Atom
- Schwingungen äquidistant im q Raum

$$q_{k+1} - q_k = \frac{2\pi}{L}$$

- Ω_k wird von der Dispersionrelationen bestimmt (diese sind im allgemeinen nicht äquidistant)

Anzahl der Frequenzen pro Intervall $\Delta\Omega$

$$2 \cdot \frac{L}{2\pi} \Delta q \cdot \frac{\Delta\Omega}{\Delta\Omega} = \frac{L}{\pi} \cdot \frac{\Delta\Omega}{\left(\frac{d\Omega}{dq}\right)} = D(\Omega)\Delta\Omega$$

für 2 dimensionale Betrachtungen geht man analog vor.

Trägt man q_x gegen q_y auf, so erhält man ein Gitter. Der Abstand der Punkte ist dabei $\frac{2\pi}{L}$. Mit $|q|$ wird ein Kreis in diesem Gitter beschrieben. Wir konstruieren einen weiteren Kreis, diesmal mit $|q + \Delta q|$. Des weiteren ist die **Fläche Pro Punkt** $\left(\frac{2\pi}{L}\right)^2$. Damit werden die Anzahl der Zustände zwischen $|q|$ und $|q + \Delta q|$ beschrieben.

Skizze 1 vom 17.06.08

$$\begin{aligned} D(q)\Delta q &= (\pi(q + \Delta q)^2 - \pi q^2)^2 \cdot \left(\frac{L}{2\pi}\right)^2 \\ &= 2\pi q \Delta q \cdot q \left(\frac{L}{2\pi}\right)^2 = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^2 2\pi q \cdot \frac{d\Omega}{v_g} \\ &= D(\Omega)d\Omega \end{aligned}$$

Im 3-Dimensionalen ist es das **Volumen pro Zustand** (Schwingung) $\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3$. Die Fläche einer Schale ist $4\pi q^2$ und das Volumen beträgt $4\pi q^2 \Delta q$.

Die Zustandsdichte ist:

$$\begin{aligned} D(q)\Delta q &= 4\pi q^2 \Delta q \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \\ &= \frac{V}{2\pi^2} \cdot \frac{d\Omega}{v_g} q^2 \\ &= D(\Omega)d\Omega \end{aligned}$$

4.6.4 Debye-Modell (Fortsetzung)

Annahme: Wir haben nur akustische Phononen.

$$v_g = \frac{d\Omega}{dq} = \text{const}, \quad \Omega = c_{\text{Schall}} q$$

$$D(\Omega) = \text{const}_1 \cdot q^2 = \text{const} \cdot \Omega^2 = \frac{V}{2\pi^2} \cdot \frac{\Omega^2}{c^3}$$

Skizze 2 vom 17.06.08

Betrachten wir an dieser Stelle Abb. 4.6 auf Seite 56

Anzahl der Zustände:

$$\int_0^\infty D(\Omega) d\Omega = 3N$$

Debye:

$$\int_0^{\Omega_D} \Omega^2 \text{const} d\Omega = 3N$$

$$\frac{\text{const}}{3} \Omega_D^3 = 3N$$

$$\Rightarrow \text{const} = \frac{9N}{\Omega_D^3}$$

$$U = \frac{9N}{\Omega_D^3} \int_0^{\Omega_D} \frac{\hbar \Omega}{e^{\hbar \frac{\Omega}{kT}} - 1} \Omega^2 d\Omega$$

Skizze 3 vom 17.06.08

$$c_v = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_v$$

$$\hbar \Omega_D = kT_D - \text{Debye-Temperatur}$$

Betrachten wir nun die verschiedenen Fälle der Kurve U :

1. $\hbar \Omega_D \ll kT$

$$U \approx \frac{9N}{\Omega_D^3} \int_0^{\Omega_D} kT \Omega^2 d\Omega = 3NkT \quad \text{klassischer Grenzfall}$$

2. $\hbar \Omega_D \gg kT$

$$U \approx \frac{9N}{\Omega_D^3} \int_0^\infty \frac{\hbar \Omega}{e^{\frac{\hbar \Omega}{kT}} - 1} \Omega^2 d\Omega$$

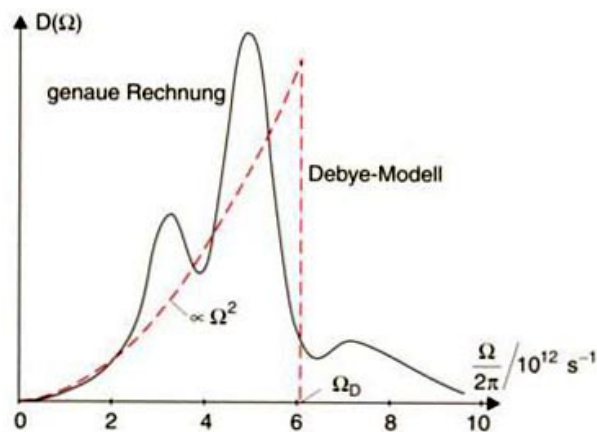


Abb. 4.6: Zustandsdichte und **Debyesche Grenzfrequenzen** im **Debye-Modell** für *NaCl*, verglichen mit dem aus gemessenen Kraftkonstanten berechneten Verlauf von $D(\Omega)$.

Betrachten wir den Übergang:

$$\frac{\hbar\Omega}{kT} \rightarrow x$$

Damit folgt:

$$\begin{aligned} U &= \frac{9N}{\Omega_D^3} \cdot \frac{(kT)^4}{\hbar^3} \int_0^\infty \frac{\frac{\hbar\Omega}{kT}}{e^x - 1} \frac{\hbar^2\Omega^2}{(kT)^2} \cdot d \frac{\hbar\Omega}{kT} \\ &= \frac{9N}{\Omega_D^3} \cdot \frac{(kT)^4}{\hbar^3} \int_0^\infty \frac{x^3}{e^x - 1} dx \frac{\pi^2}{15} \quad \sim T^4 \\ c_v &\sim T^3 \end{aligned}$$

4.7 Die Wärmeleitung von Isolatoren

Der Wärmetransport allgemein wird durch „ j “ beschrieben. Dabei ist j wie folgt definiert:

$$j = -K \frac{dT}{dx}$$

Nach der Gastheorie ist K die **Wärmeleitzahl**, c_v die **spezifische Wärme**, v die **mittlere Teilchengeschwindigkeit** und l die mittlere freie Weglänge, damit ergibt sich:

$$K = \frac{1}{3} c_v v l$$

1. bei hoher Temperatur ist $c_v \approx \text{const.}$

$$l \sim \frac{1}{\text{Anzahl der Phononen}} \sim \frac{1}{T}$$

2. bei tiefen Temperaturen ist $c \sim T^3$ (Debye) und $l \sim$ dicke der Probe.

$$\Rightarrow K \sim T^3$$

Skizze 4 vom 17.06.08

Typische Werte sind:

- **Saphir** (AlO_3): $K(30K) \sim 200 \frac{W}{cm \cdot K}$
- **Kupfer** (Cu): $K(30K) \sim 100 \frac{W}{cm \cdot K}$

Es gilt:

$$\vec{q}_1 + \vec{q}_2 = \vec{q}_3 + \vec{G}$$

mit $\vec{G} \neq \vec{0} \equiv$ **Umklappprozesse**. Sie sind verantwortlich für endliche Werte der Wärmeleitzahl.

5 Elektronen im Festkörper

24.06.08

5.1 Das freie Elektronengas

5.1.1 Elektronische Energieniveaus im Eindimensionalen

Definition. Schrödinger-Gleichung im Eindimensionalen (mit freien Elektronen):

Skizze 1 vom 24.06.08

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{d^2 \psi}{dx^2} + V(x)\psi = E \cdot \psi$$
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{d^2 \psi}{dx^2} = E \cdot \psi$$

Die allgemeinen Lösungen sind hier:

$$\psi_n = A_n \sin k_n \cdot x$$
$$k_n = \frac{\pi}{L} \cdot n$$
$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{L} \right)^2 n^2$$

mit $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ folgt dann:

$$= \frac{h^2}{2m} \cdot \left(\frac{n}{2L} \right)^2$$

Beim Auffüllen des Potentialtopfes muss das **Pauli-Prinzip** beachtet werden. Das **Pauli-Prinzip** besagt, dass es 2 Elektronen pro Niveau geben darf. Bei N Elektronen heißt das, dass wir $n = \frac{N}{2}$ Niveaus haben (wobei immer auf ganze Zahlen aufgerundet wird). Zu beachten ist auch, dass $T = 0$ ist.

$$E_{\max} = \frac{h^2}{2m} \cdot \left(\frac{N}{4L} \right)^2$$

Fermi-Energie

Beispiel: Eindimensionaler Kristall mit 1 $\frac{e^-}{\text{Atom}}$, und $a = \overset{\circ}{\text{Å}}$

$$E_F = \frac{h^2}{2m} \left(\frac{1}{4a} \right)^3 \sim 9eV \sim 10^5 K (!)$$

$$T_F = \frac{E_F}{k_B} \gg 300K$$

entartetes Elektronengas

Dies ist ein rein quantenmechanischer Effekt, der nur Elektronen betrifft, da ihre Masse so gering ist.

Skizze 2 vom 24.06.08

5.1.2 Zustandsdichten im 3 Dimensionalen

Anzahl der Zustände bis

$$n = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} 2L$$

Zustandsdichte $dn = D(E) \cdot dE$

$$D(E) = \frac{dn}{dE} = \frac{2L}{\hbar} \sqrt{\frac{m}{2E}} \sim \frac{1}{\sqrt{E}}$$

Zustandsdichte im Dreidimensionalen

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] \psi &= E \cdot \psi \\ \psi &= A \cdot \sin k_x \cdot x \cdot \sin k_y \cdot y \sin k_z \cdot z \\ k_x &= \frac{\pi}{L} n_x \\ k_y &= \frac{\pi}{L} n_y \\ k_z &= \frac{\pi}{L} n_z \\ \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) &= E = \frac{\hbar^2}{2m} |\vec{k}|^2 \end{aligned}$$

Volumen pro Zustand (Zustand)

$$v = \left(\frac{2\pi}{L} \right)^3$$

5.1.3 Fermi-Dirac Verteilungsfunktion

Stellt man die k_x , k_y und k_z dreidimensional dar, dann erhält man ein Raumgitter, wobei die Gitterpunkte immer die Koordinaten $P_{i,j,l} = \left(\frac{i \cdot 2\pi}{L}; \frac{j \cdot 2\pi}{L}; \frac{l \cdot 2\pi}{L} \right)$ mit $i, j, l \in \mathbb{Z}$ haben. Man kann in dieses Koordinatensystem konzentrische Kugeln mit Mittelpunkt im Koordinatenursprung einbeschreiben. Diese Kugeln bezeichnet man als **Fermi-Kugeln**. **Es fehlt das Bild einer Fermi-Kugel mit dem Bereich der verbotenen Stoßpartnern.**

Das Kugelvolumen im k -Raum beträgt hierbei bis zur Energie E :

$$\begin{aligned} V_x &= \frac{4}{3} \pi k^3 \\ &= \frac{4}{3} \pi \left(\frac{2mE}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \end{aligned}$$

Damit erhält man für die Anzahl der Zustände:

$$\begin{aligned} Z &= \frac{V_x}{v} = \frac{1}{6} \frac{\pi L^3}{\pi^3} \cdot \left(\frac{2mE}{\hbar} \right)^{\frac{3}{2}} \\ &= \frac{V}{6\pi^2} \left(\frac{2mE}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \\ \Rightarrow D(E) &= \frac{dZ}{dE} = \frac{V}{3\pi} \left(\frac{2m}{\hbar} \right)^{\frac{3}{2}} \cdot E^{\frac{1}{2}} \sim \sqrt{E} \end{aligned}$$

Skizze 4 vom 24.06.08

$$\begin{aligned} Z(E_F) &= \frac{N}{2} = \frac{V}{6\pi^2} \left(\frac{2mE_F}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \\ E_F &= (3\pi^2 n)^{\frac{2}{3}} \cdot \frac{\hbar^2}{2m} \end{aligned}$$

Beispiel. Natrium Na :

$$\begin{aligned} n_e &= 2,5 \cdot 10^{22} \frac{1}{cm^3} \\ E_F &\sim 3eV \sim 3 \cdot 10^4 K \\ v_F &= \sqrt{\frac{2E_F}{m}} \sim 10^8 \frac{cm}{s} = 10^3 \frac{km}{s} \end{aligned}$$

25.06.08

5.1.4 Spezifische Wärme

$$\begin{aligned} U(T) &= \int_0^\infty E \cdot f(E) \cdot D(E) dE \\ U(T=0) &= \int_0^{E_F} E \cdot D(E) dE \\ U(T) - U(0) &\sim N \frac{kT}{E_F} \cdot kT = \frac{NkT^2}{T_F}, \end{aligned}$$

wobei $N \cdot \frac{kT}{E_F}$ der Anzahl der angeregten Elektronen entspricht und kT der Energiezuwachs ist. Klassisch Betrachtet wäre der Wert $N \cdot 1$ zu erwarten, mit anderen Worten, dass alle Elektronen angeregt werden.

$$C_{el} = \frac{\partial U}{\partial T} = 2Nk_B \frac{T}{T_F}$$

Skizze 1 vom 25.06.08

Eine genaue Rechnung liefert ($T \ll T_F$) $c_{el} = \frac{\pi^2}{2} N k_B \frac{T}{T_F}$

$$C_{el} = \gamma T$$

Das Experiment zeigt, wenn man Elektronen und Gitter betrachtet:

$$C = \gamma T + AT^3 \quad (T \sim 0)$$

$$\boxed{\frac{C}{T}} = \gamma + A \boxed{T^2}$$

$$T_F \sim \frac{1}{m_{\text{eff}}} \Rightarrow \frac{m(\text{thermisch, eff})}{m_e} = \frac{\gamma_{\text{exp}}}{\gamma_0}$$

5.1.5 Elektrische Leitfähigkeit

Klassische Herleitung nach dem **Drude-Modell**.

$$\Delta \vec{v} \parallel \vec{E}(T) \begin{cases} E_0 & \text{-Gleichstrom} \\ E_0 e^{i\omega t} & \text{Wechselstrom} \end{cases}$$

$$j \sim \sum (\vec{v} + \Delta \vec{v}) = \sum \Delta v$$

$$m \frac{d\Delta v}{dt} = e \cdot E \cdot e^{-i\omega t}$$

Vernachlässigt man die Streuung, folgt

$$\Delta v = \int \frac{e \cdot E}{m} \cdot e^{-i\omega t} dt = \frac{e \cdot E}{-i\omega m} \cdot e^{i\omega t}$$

$$j = e \cdot n \cdot \Delta v = \frac{n \cdot e^2}{-i\omega m} \cdot E \cdot e^{-i\omega t}$$

$$= \sigma E e^{i\omega t}$$

Für einen **Supraleiter** muss demnach

$$\Rightarrow \sigma = \frac{n e^2}{m} \cdot \frac{1}{-i\omega}$$

Mit Streuung ist dann:

$$\left. \begin{array}{l} e^- = e^- \\ e^- - \text{Phonon} \end{array} \right\} \text{Stöße}$$

$$\frac{d\Delta v}{dt} + \frac{m}{\tau} \Delta v = e E e^{-i\omega t}$$

$$\Delta v = A \cdot e^{-i\omega t}$$

$$\left(-mi\omega + \frac{m}{\tau}\right) A e^{-i\omega t} = e \cdot E \cdot e^{-i\omega t}$$

$$\Delta v = \frac{e \cdot E}{-mi\omega + \frac{m}{\tau}} \cdot e^{-i\omega t}$$

$$\Rightarrow \sigma = \frac{ne\Delta v}{E(t)} = \frac{ne^2}{\left(\frac{1}{\tau} - i\omega\right)}$$

5 Elektronen im Festkörper

Im Fall von Gleichstrom, also $\omega = 0$ gilt:

$$\sigma_0 = \frac{1}{\varrho} = \frac{ne^2}{m}\tau$$

Bei Wechselstrom, Absorption wird durch den Realteil gegeben: $\text{Re}(\sigma) = \sigma_1$

$$\begin{aligned}\sigma_1 &= \frac{\frac{ne^2}{m}\tau}{1 + \omega^2\tau^2} \\ &= \frac{\sigma_0}{1 + \omega^2\tau^2}\end{aligned}$$

Skizze 3 und 4 vom 25.06.08

Quantenmechanische Rechnung liefert

$$\begin{aligned}\Delta\vec{v} &= \frac{Ee\Delta t}{m} \\ Ee\,dt &= f \cdot dt \\ &= dp \\ &\equiv \hbar dk \\ \Rightarrow \sigma &= \frac{ne^2}{m} \cdot \tau\end{aligned}$$

5.1.5.1 Hall-Effekt

Skizze 5 vom 25. 06.08 Ohne Magnetfeld:

$$\vec{j} = \sigma \cdot \vec{E} = \frac{ne^2}{m}\tau\vec{E} = ne\vec{v}$$

Schaltet man das Magnetfeld ein, so gilt anschließend:

$$F_m = e\vec{v} \times \vec{B} = \frac{j}{n} \times B$$

im Leiter wandern die Elektronen durch die Kraft $\vec{F}_m$ nach oben, bzw. nach unten, sodass sich im Leiter selbst ein weiteres elektrisches Feld einstellt,

$$e \cdot \vec{E}_H = \vec{F}_m = \frac{\vec{j} \times \vec{B}}{n}$$

wir Definieren den **Hall-Widerstand**

$$R_H = \frac{\vec{E}_H}{\vec{j} \cdot \vec{B}} = \frac{1}{ne}$$

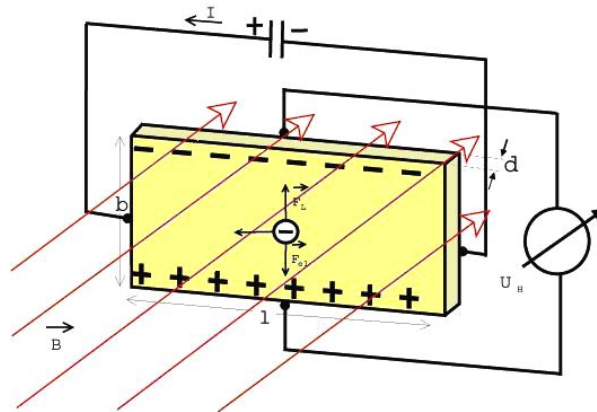


Abb. 5.1: Aufbau und Wirkungsweise einer **Hall-Sonde**

Dies ist eine Methode um die Elektronendichte zu messen. Typische Werte in Metallen sind:

$$= \frac{1e^-}{(5 \text{ \AA})^3} \sim 10^{22} \frac{1}{\text{cm}^3}$$

Experimentelle Konfiguration siehe Abb. 5.1 auf Seite 63. Dort ist die **Hall-Sonde** abgebildet. Mit ihr kann man die Stärke von Magnetfeldern bestimmen.

5.2 Elektronen im periodischen Potential

5.2.1 Einleitung

Annahmen die man früher getroffen hat:

1. Es finden keine Wechselwirkungen zwischen den Elektronen statt
2. Es werden Kastenpotentiale betrachtet

Das Modell kann die

- Leitfähigkeit
- spezifische Wärme
- thermische Leitfähigkeit und
- den Hall-Effekt

zwar erklären, allerdings versagt es bei der Bestimmung der

- effektiven Masse
- positiven Hall-Konstanten
- Unterschieden zwischen Metallen, Halbleitern und Isolatoren

5.2.2 Elektronen im periodischen Potential (Blochsches Theorem)

01.07.08

Man löst die Schrödinger-Gleichung für **ein** Elektron unter der Annahme, dass $V(\vec{r})$ periodisch ist:

$$\begin{aligned}\hat{H}\psi(\vec{r}) &= E(\vec{r}) \\ \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}) &= E \cdot \psi(\vec{r}) \\ V(\vec{r}) &= V(\vec{r} + \vec{r}_n), \quad \vec{r}_n = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3 \\ & \quad n \in \mathbb{N}\end{aligned}$$

$V(\vec{r})$ ist periodisch, das heißt $|\psi(\vec{r})|^2$ (also die **Elektronendichte**) ist ebenfalls periodisch.

Im Eindimensionalen gilt:

$$|\psi(\vec{x} + \vec{a})|^2 = |\psi(\vec{x})|^2,$$

wobei a die **Gitterkonstante** ist

Der allgemeinere Ansatz

$$\psi(\vec{x}) = n(\vec{x})e^{i\vec{k}\vec{x}}$$

(mit $\vec{k}$ als **Wellenvektor** mit $\vec{p} = \hbar\vec{k}$) mit $n(\vec{x}) = n(\vec{x} + \vec{a})$ und $e^{i\vec{k}\vec{x}}$ als **Phasenfaktor**. Dies ist analog der ebenen Welle $A \cdot e^{i\vec{k}\vec{x}}$.

5.2.2.1 Blochsches Theorem

Die Lösung der Ein-Teilchen-**Schrödinger-Gleichung** (SGL) mit periodischem Potential kann als **ebene Welle**

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

mit gitterperiodischen Modulationsfaktor $U_{\vec{k}}(\vec{r})$ beschrieben werden.

Skizze 1 vom 01.07.08

Beispiel.

- getrennte Atome:

$$U_k(x) = \sum_{k=0} \text{Atomwellenfunktionen}$$

- freie Elektronen:

$$U \approx \text{const}$$

$$\psi \sim e^{i\vec{k}\vec{r}}$$

Bemerkung. Die Forderung der Gitterperiodizität hat Konsequenzen für die **Energieeigenwerte** der **Blochzustände**:

im Eindimensionalen:

$$E\left(k + \frac{2\pi}{a}\right) = E(k) = E\left(k + n \cdot \frac{2\pi}{a}\right), \quad n \in \mathbb{N}$$

Wir betrachten den reziproken Raum. Man erhält (wenn man $E(k)$ gegen k aufträgt) Parabeln, die lediglich um $2n \cdot \frac{2\pi}{a}$ verschoben zueinander sind (wobei $n \in \mathbb{Z}$).

Skizze 2 vom 01.07.08

Die Periodizität von $E(k)$ im k -Raum erlaubt es, sämtliche Betrachtungen auf die erste Brillon-Zone (BZ) zu reduzieren. Absorption der Photonen durch Elektronen: Es gilt die Energieerhaltung. Es ist demnach:

$$\omega_{el}^1 = \omega_{el}^0 + \omega_{ph}.$$

Des Weiteren gilt wegen der Impulserhaltung:

$$k_{el}^1 = k_0^{el} + k_{ph} \approx k_{el}^0$$

5.2.3 Näherung für quasifreie Elektronen

Gegeben ist ein periodisches Potential das langsam angeschaltet wird. Die Energieeigenwerte entarten am Zonenrand ($\vec{k} = \pm \frac{\pi}{a}$); aus der Superposition der beiden Wellen folgt die **Bragg-Streuung**. Es kommt zur Herausbildung einer **stehenden Welle** in der Form:

$$\begin{aligned} \psi_+ &= e^{i\frac{\pi}{a}\vec{x}} + e^{-i\frac{\pi}{a}\vec{x}} \sim \cos\left(\frac{\pi}{a}\vec{x}\right) \\ \psi_- &= e^{i\frac{\pi}{a}\vec{x}} - e^{-i\frac{\pi}{a}\vec{x}} \sim \sin\left(\frac{\pi}{a}\vec{x}\right) \end{aligned}$$

mit der **Wahrscheinlichkeitsdichte**

$$\begin{aligned} p_+ &\sim |\psi_+|^2 \sim \cos^2\left(\frac{\pi}{a}x\right) \\ p_- &\sim |\psi_-|^2 \sim \sin^2\left(\frac{\pi}{a}x\right) \end{aligned}$$

Skizze 3 vom 01.08.08

$p_+(x)$ hat eine hohe Dichte am Ort der Rümpfe und demzufolge eine **niedrigere (pot) Energie**

$p_-(x)$ hat eine hohe Dichte zwischen den Rümpfen und damit also eine **höhere (pot) Energie**

Skizze 4 vom 01.07.08

Was fällt bei der Betrachtung der Funktionen auf?

- Es kommt zur Abweichung von der Parabelform am Zonenrand
- weiter gibt es eine Bandaufspaltung: Es gibt also **energetisch „erlaubte“ und „verbotene“ Bereiche**
- die Größe der Bandaufspaltung hängt von der Stärke des Potentials ab
- reduziert man das Zonenschema, gilt:
alle Bänder liegen in der ersten BZ
- für das periodische Zonenschema gilt:
alle Bänder liegen in allen Zonen
- und beim erweiterten Zonenschema:
1., 2., 3., ... Band in 1., 2., 3., ... Brillouin-Zone

Skizze 5 vom 01.07.08

5.2.4 Näherung für stark gebundene Elektronen

08.07.08

Skizze 1 vom 08.07.08

Wir betrachten hier zwei Potentialtopfe (φ_1 und φ_2). Innerhalb des Topfes schwingt das Elektron cosinusförmig. Außerhalb steigt bzw fällt die Energie mit $\exp\left(\frac{x}{s}\alpha\right)$. Betrachtet man N - Atome so erhält man N Energien und damit auch N -Lösungen. Die Gesamtlösung ist $\varphi_1 + \varphi_2$ bzw. $\varphi_1 - \varphi_2$.

Bemerkung. Die Bänder sind energetisch umso breiter, je stärker der Überlapp zwischen den Wellenfunktionen benachbarter Atome ist

- (a) tiefer liegende Niveaus liefern schmalere Bänder
- (b) höher liegende Niveaus (**Valenzelektronen**) führen zu breiteren Bändern

16.07.08



Abb. 5.2: Aufbau der Messapparatur zur **Photoemissionsspektroskopie**

5.2.5 Photoelektronenspektroskopie

Bemerkung. Ergänzung zu 5.2.5.3. Photoelektronenspektroskopie

5.3 Elektronische Eigenschaften fester Stoffe

(a) Metalle,

Bei Metallen ist das Leitungsband ungefähr halb gefüllt

Skizze 2 vom 08.07.08

der spezifische elektrische Widerstand ist

$$\varrho = \frac{1}{\sigma} = \left(\frac{ne^2}{m} \tau \right)^{-1}$$

(b) Halbleiter

nicht dotierte Halbleiter:

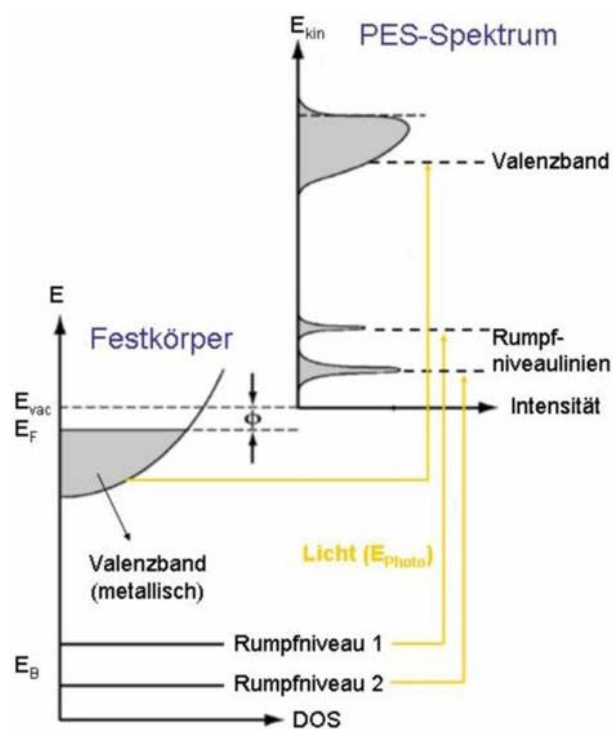


Abb. 5.3: Darstellung des *PES* Spektrum

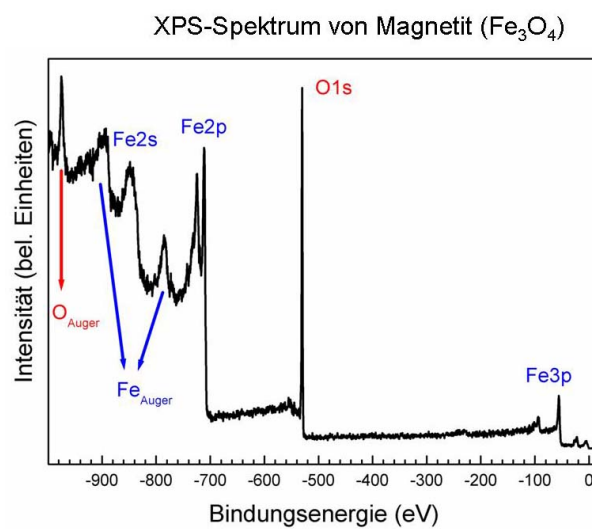


Abb. 5.4: XPS-Spektrum von Magnetit (Fe_3O_4)

Cu

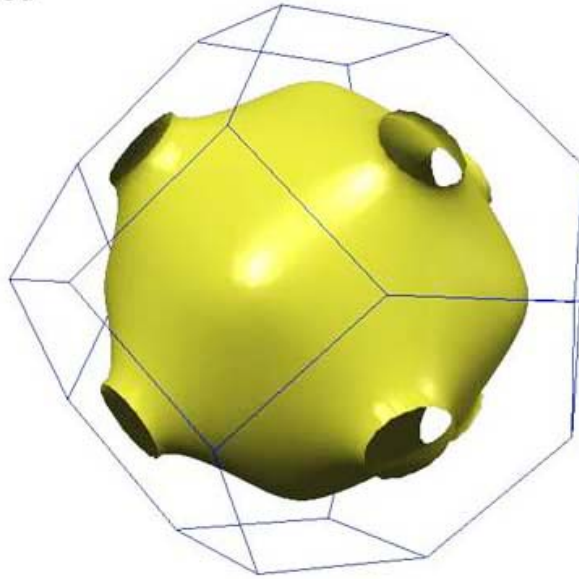


Abb. 5.5: **Fermi-Fläche** für Kupfer

Al

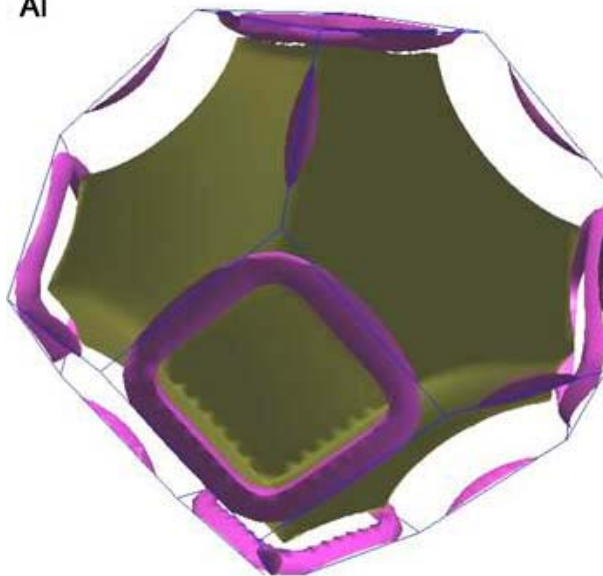


Abb. 5.6: **Fermi-Fläche** von Aluminium

Das Leitungsband ist nur sehr gering gefüllt. Die Energie, die ein Elektron aufbringen muss, um vom Valenzband in das Leitungsband zu springen ist etwa im Bereich von $\Delta E = 0,5\text{eV}$. n_e ist die Anzahl der Elektronen im Leitungsband, n_h entspricht der Anzahl der „Löcher“ im Valenzband.

$$n_e = n_h \sim e^{-\frac{\Delta E}{2kT}}$$

Skizze 3 vom 08.07.08

(c) Isolatoren

Skizze 4 vom 08.07.08

Im Prinzip ist der Aufbau ähnlich wie beim Halbleiter, allerdings mit dem wesentlichen Unterschied, dass die Energiedifferenz zwischen Leitungsband und Valenzband $\Delta E \gtrsim 3\text{eV}$ beträgt.

Es gibt außerdem eine sogenannte **Hüpfleitfähigkeit**, das heißt, dass angeregte schwingende Elektronen irgendwann mit einer endlichen Wahrscheinlichkeit diese Energiedifferenz ΔE überwinden können.

6 Halbleiter

6.1 Charakteristische Eigenschaften

- $10^{-4}\Omega cm \lesssim \varrho \lesssim 10^{12}\Omega cm$
- ϱ ist stark Temperaturabhängig
- $T = 0 \Rightarrow$ Halbleiter wird zum Isolator ($\varrho = \infty$)

6.2 Beispiele

- *Si* – *Ge* III-V-Halbleiter sind:
Si, *Ge*, *GaAs*, *InP*
- II-IV-Halbleiter *CdSe*, *ZnS*- **Zinkblende-Struktur**

Diamantstruktur: *fcc* und $\circ-\circ$ (Basis)

Zinkblende-Struktur: *fcc* und $\circ-\cdot$ (Basis)

6.3 Bandstrukturen

(zunächst sei $T = 0$)

Skizze 5 vom 08.05.08

Zwischen Leitungsbandminimum und Valenzbandmaximum liegt das **verbotene Band**. Das verbotene Band hat eine Energiedifferenz von $0,3eV - 3eV$.

Direkte Lücke

Das heißt, das Minimum des Leitungsbandes liegt direkt über dem Maximum des Valenzbandes. Kommen Lichtphotonen mit der Energie $E = \hbar c \vec{k}$ so können die Elektronen die Energielücke $E_g = \hbar \omega_{ph}$ überwinden.

indirekte Lücke

Hier findet der Impulsübertrag durch Phononen statt, dabei gilt:

$$\left(\underbrace{\hbar \Omega}_{\text{Phonon}} \ll \underbrace{\hbar \omega}_{\text{Photon}} \right).$$

09.07.08

6.3.1 Das Lochkonzept

Definition. Löcher sind unbesetzte Zustände im Valenzband. Im folgenden werden Elektronen mit „ e^- “ und Löcher mit „ h “ („hole“) bezeichnet.

1. eine fehlende negative Ladungen erscheint als positive Ladung $q(h) = +e$.

Skizze 1 vom 09.07.08

2. ein tieferliegendes Loch hat eine höhere Energie

Skizze 2 vom 09.07.08

$$E_h(k) = -E_e(k) \quad \text{Im Valenzband}$$

3. $v_e = v_h$

4. $m_h = -m_e$; $m_e(VB) < 0, \Rightarrow m_h > 0$.

Skizze 3 vom 09.07.08

Konzept der effektiven Masse:

$$\begin{aligned} E &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \\ \rightarrow \frac{\hbar^2 (k + k_0)^2}{2m} - E_0 &= E \\ E &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + Ak + B \\ \Rightarrow m^{-1} &= \frac{d^2 E \cdot 1}{dk^2 \cdot \hbar^2} \end{aligned}$$

Dies gilt auch für Metalle.

Für Halbleiter gilt:

$$m_e^*(typ); 0,02 \text{ bis } 1m_e$$

$$m_h^*(typ); 0,1 \text{ bis } 1m_e$$

wobei m^* die effektive Masse und m_e die Ruhemasse m_0 ist.

5. aus 3. und 4. folgt: $p_h = -p_e(VB)$; $k_h = -k_e$

Bemerkung. Ergänzung zu Kapitel 5.2.2.1. Interbandanregung – 2 Zyklotronresonanz.

Die **klassische** Betrachtung liefert: Skizze 8 vom 15.07.08

$$\begin{aligned}
m \frac{v^2}{r} &= qeB \\
m \frac{v}{r} &= m\omega_c = qB \\
\Rightarrow \omega_c &= \frac{qB}{m^*}
\end{aligned}$$

Resonanz tritt für den Fall $\omega = \omega_c$ auf. Damit kann man die effektive Masse bestimmen.

Betrachtet man das ganze **Quantenmechanisch**

$$\begin{aligned}
\hbar \frac{d\vec{k}}{dt} &= -e\vec{v}_g \times \vec{B} \\
&= -e\nabla_k E \times B
\end{aligned}$$

Dies beschreibt die Bewegung entlang der Fläche mit konstanter Energie. Die geschlossenen Bahnen liegen auf der **Fermi-Fläche**

6.4 Ideal und Realhalbleiter

... unbedeutend

6.5 Eigenleitung (ohne Dotierung und Störstellen)

$$n_e = n_h$$

Treffen wir folgende Annahme:

$$\begin{aligned}
E_\mu &\gg kT \\
\Rightarrow f_e &\approx e^{\frac{(\mu-E)}{kT}};
\end{aligned}$$

das ist die Wahrscheinlichkeit, dass ein Niveau im **Leitungsband** besetzt ist. Dies gilt für $f \ll 1$, μ ist erstmal eine Unbekannte.

Skizze 4 vom 09.07.08

Das Leitungsband, oder auch **LB** entspricht ungefähr den freien Elektronen. Es gilt:

$$\begin{aligned}
E &= E_c + \frac{k^2 \hbar^2}{2m} \\
D(E) &= \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} (E - E_c)^{\frac{1}{2}}
\end{aligned}$$

$D(E)$ ist pro Volumeneinheit. Es hat 2 Spinnrichtungen.

- Konzentration von Elektronen im Leitungsband

Skizze 5 vom 09.07.08

$$\begin{aligned}
 n &= \underbrace{\int_{E_c}^{\infty}}_{\text{Leitungsband}} D(E) \cdot f(E) \cdot dE \\
 n &= \frac{1}{2\pi^2} \cdot \left(\frac{2m_e}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \cdot e^{\frac{\mu}{kT}} \cdot \int_{E_c}^{\infty} (E - E_c)^{\frac{1}{2}} \cdot e^{-\frac{E}{kT}} \cdot dE \\
 &= \left| \frac{E - E_c}{kT} = \alpha \right| \\
 &= \frac{1}{2\pi^2} \cdot \left(\frac{2m_e \cdot kT}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \cdot e^{\frac{\mu - E_c}{kT}} \int_0^{\infty} \alpha^{\frac{1}{2}} \cdot e^{-\alpha} d\alpha \\
 \Delta n &= 2 \cdot \left(\frac{m_e kT}{2\pi \hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \cdot e^{\frac{(\mu - E_c)}{kT}}
 \end{aligned}$$

- Berechnung der Löcherkonzentration

Skizze 6 vom 09.07.08

$$f_h = 1 - f_e$$

Das Loch wird also als fehlendes Elektron bewertet

$$\begin{aligned}
 f_h &= 1 - \frac{1}{1 + e^{\frac{E - \mu}{kT}}} \\
 &= \frac{e^{\frac{E - \mu}{kT}}}{1 + e^{\frac{E - \mu}{kT}}} \\
 f_h &\approx e^{\frac{E - \mu}{kT}} \ll 1
 \end{aligned}$$

Rechnung ähnlich wie oben

$$\Rightarrow \Delta p = n_h = 2 \cdot \left(\frac{m_h \cdot k \cdot T}{2\pi \hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \cdot e^{\frac{(E_v - \mu)}{kT}}$$

$\Rightarrow n \cdot p$ hängt nicht von μ ab. Die entstandene **Energielücke** wird beschrieben durch:

$$E_g = E_c - E_v$$

Die folgende Formel gilt **immer**:

$$n \cdot p = 4 \cdot \left(\frac{kT}{2\pi \hbar^2} \right)^3 \cdot (m_e \cdot m_h)^{\frac{3}{2}} \cdot e^{\frac{E_g}{kT}}$$

Skizze 7 vom 09.07.08

Wir nehmen an, dass $p = \frac{\text{const}}{n}$ und weiter, dass $n = p$ Eigenleitung bzw. am wenigsten Leitung.

Eigenleitung

$$\underbrace{n_i = p_i}_{=\sqrt{n \cdot p}} = 2 \cdot \left(\frac{kT}{2\pi\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \cdot (m_e \cdot m_h)^{\frac{3}{4}} \cdot e^{-\frac{E_g}{2kT}}$$

$$n_i = p_i \Rightarrow m_e^{\frac{3}{2}} \cdot e^{\frac{\mu - E_c}{kT}} = m_h^{\frac{3}{2}} \cdot e^{\frac{E_v - \mu}{kT}}$$

$$e^{\frac{2\mu}{kT}} = \left(\frac{m_h}{m_e} \right)^{\frac{3}{2}} \cdot e^{\frac{E_c + E_v}{kT}}$$

$$\mu = (E_c + E_v) \cdot \frac{1}{2} + \frac{3}{2}kT \ln \left(\frac{m_h}{m_e} \right)$$

mit der **Nullenergie** bei E_v (am einfachsten $E_v = 0$)

$$\Rightarrow \mu = \frac{1}{2}E_g$$

Skizze 8 vom 09.07.08

6.6 Ladungsträgerkonzentration dotierter Halbleiter

Definition. Dotierung:

Die Einführung von **Fremdatomen** mit einer anderen Valenz bezeichnet man als **Dotierung**.

Beispiel. $As(V)$ in $Si(IV)$ [Sprich: 5-wertiges Arsen wird in 4-wertiges Silizium eingebracht.]

Skizze 1 vom 15.07.08

Betrachten wir die Näherung für Wasserstoffatome:

$$E_n = -13,6eV \frac{1}{n^2\epsilon^2} \cdot \frac{m_e^*}{m_e}$$

$$Si : m_e^* \approx 0,3m_e \quad \epsilon \approx 12$$

$$\Rightarrow E_1 = -28meV \sim 50K$$

$$r_n = r_n(H) \cdot \epsilon \cdot \frac{m_e}{m_e^*},$$

$$r_1 \approx 2nm \quad \sim 4 \text{ Gitterkonstanten}$$

Dies ist hier der **Donator**. 3-wertige Atome dienen dazu, Elektronen einzufangen. Das chemische Element, das dies tut, nennt man **Akzeptor**. Betrachtet man wieder das Bild mit Leitungsband und Valenzband eines dotierten Halbleiters, so stellt man fest, dass der Donator durch seine freien Elektronen die **Fermi-Energie** energetisch nach oben verschiebt. Der Akzeptor verschiebt die **Fermi-Energie** energetisch nach unten. Dotierung von Halbleitern führt also zu einer höheren Dichte der freien Ladungsträger bzw. '+' zu einer höheren Empfindlichkeit auf äußere Energiequellen.

Skizze 2 vom 15.07.08

$$n_e \approx \frac{N_D}{e^{\frac{(E_D - \mu)}{kT}} + 1} \sim e^{-\frac{E_D}{kT}}$$

$$n_n \approx \frac{N_A}{e^{\frac{\mu - E_A}{kT}} + 1} \sim e^{-\frac{E_A}{kT}}$$

Bemerkung. Typische Werte sind, (wenn wir nur **Donatoren** betrachten):

$$N_D \sim 10^{16} \text{ cm}^{-3}$$

$$T = 300 \text{ K}$$

$$E_D - \mu \sim 20 \text{ meV}$$

$$\Rightarrow n_e \sim 2 \cdot 10^{15} \frac{1}{\text{cm}^3}$$

Die Eigenleitung ohne Dotierung wäre in diesem Beispiel $\sim 10^6 \frac{1}{\text{cm}^3}$ ($E_g \sim 1 \text{ eV}$)

Beweglichkeit

$$\left. \begin{array}{l} \mu = \frac{|v|}{E} \\ j = nev \\ j = \sigma E \\ \sigma = \frac{ne^2}{m} \tau \end{array} \right\} \Rightarrow \begin{array}{l} \sigma = ne\mu \\ \mu = \frac{e}{m} \tau \end{array}$$

6.7 *p-n*-Übergang im Gleichgewicht

Skizze 3 und 4 vom 15.07.08

Unmittelbar nach dem Kontakt befindet sich die Kontaktstelle noch nicht im Gleichgewicht der Energieniveaus. Dann setzt eine Diffusion der e^- ein bis sich ein Gleichgewicht der Energie gebildet hat. Es wandern die Elektronen zu den „Löchern“, dadurch entsteht eine **Grenzspannung** und eine **Grenzladung**.

Skizze 5 vom 15.07.08

Es findet eine Verschiebung der Energie um $\Delta = U_D \cdot e$ statt. Damit ist eine weitere Diffusion unterbunden.

Im Gleichgewichtsfall ist μ überall konstant

Bemerkung. Zur Vereinfachung sei im Folgenden $\frac{E}{kT} = E$.

$$\left(2 \frac{m_e kT}{2\pi \hbar^2} \right) = n_0$$

$$\left(2 \frac{m_e kT}{2\pi \hbar^2} \right) = p_0$$

Bereich 1(p):

$$n_1 = n_0 \cdot e^{\mu - E_c},$$

$$p_1 = p_0 \cdot e^{E_v - \mu}$$

Bereich 2(n):

$$n_2 = n_0 \cdot e^{\mu - E_c + \Delta},$$

$$p_2 = p_0 \cdot e^{E_v - \mu + \Delta}$$

Anmerkung:

$$n_1 \cdot p_1 = n_2 \cdot p_2 = n_0 \cdot p_0 \cdot e^{-\frac{E_g}{kT}}$$

$$\frac{n_2}{n_1} = e^{\Delta} = \frac{p_1}{p_2}$$

$$\Rightarrow \boxed{e \cdot U = \Delta = kT \ln \frac{n_2}{n_1} = kT \ln \frac{p_1}{p_2}}$$

6.7.1 p - n -Übergang im Nichtgleichgewicht

Skizze 6 vom 15.07.08

Definition. Betrachten wir den Stromfluss durch den Halbleiter:

$$I_{ges} = I = I_r - I_G$$

Dabei ist I_r der **Rekombinationsstrom** und I_G der **Generationsstrom**, der durch die thermische Anregung der Ladungsträger erzeugt wird.

Es gilt:

$$I_G \approx \text{const}(U) = I_r(0)$$

$$I_r(U) = i_r(0) \cdot e^{e \cdot \frac{U_A}{kT}}$$

$$U_A = 0$$

$$\Rightarrow I = 0$$

$$U_A \neq 0$$

$$\Rightarrow I = I_r(0) \left(e^{\frac{eU_A}{kT}} - 1 \right)$$

Abbildungsverzeichnis

1.1	Funktionsweise eines LCD	10
1.2	Fraktalbeispiel: Blumenkohl; Quelle: Internet	11
1.3	Fraktalbeispiel: Mathematik; Quelle: Internet	12
2.1	Entstehung von Kristallstrukturen; Quelle: Kittel, Abb. 1.4	13
2.2	Titel?	14
2.3	Titel?	14
2.4	Wigner-Seitz-Zelle; Quelle: Wikipedia	15
2.5	Gitterstrukturen im zweidimensionalen Raum	17
2.6	<i>sc</i> , <i>bcc</i> und <i>fcc</i> -Gitter; Quelle: nach Wikimedia	17
2.7	Hexagonales System, Quelle ???	18
2.8	Millersche Indizes; Quelle: Wikimedia	20
2.9	Kristallstruktur von <i>NaCl</i> ; Quelle: ???	21
2.10	Modell von <i>NaCl</i>	22
2.11	Rombisch-Primitive Zelle; Quelle: ???	22
2.12	Kristallstruktur von <i>CsCl</i> ; Quelle: ???	23
2.13	Hexagonal dichteste Packungen; Quelle: ???	24
2.14	<i>hcp</i> -Raumgitter; Quelle: ???	24
2.15	Diamantstruktur im <i>fcc</i> Gitter; Quelle: ???	25
2.16	Schotky und Frenkel-Defekt im Kristall; Quelle: ???	26
2.17	Frenkel-Zentrum; Quelle: ???	26
2.18	Schraubenversetzung von Kristallen; Quelle: Nach Cottrell	27
2.19	Dehnung eines Kristalls; Quelle: ???	27
3.1	Brillouin-Zone des <i>fcc</i> im Reziproken Raum; Quelle: ???	30
3.2	Erste Brillouin-Zone des <i>fcc</i> Gitters; Quelle: ???	30
3.3	Aufbau einer Röntgenröhre; Quelle: PSI-Paul Scherrer Institut	33
3.4	Charakteristische Röntgenstrahlung; Quelle: ???	34
3.5	Vergleich von Röntgenreflexen; Quelle: ???	39
3.6	Analyseprinzip nach Laue; Quelle: ???	40
3.7	Laue Bild eines <i>LaMnO</i> -Einkristalls; Quelle: ???	40
3.8	Debye-Scherer-Verfahren; Quelle: ???	41
4.1	[Strukturbild eines <i>NaCl</i> Kristalls; Quelle: ???	46
4.2	Neutronenstreuungsmeter Agnes; Quelle: ???	49
4.3	Messmethode von Agnes; Quelle: ???	50
4.4	Phononendispersion mittels Neutronenstreuung; Quelle: ???	50
4.5	Spezifische Wärme vgl. Einstein und klassisches Modell; Quelle: ???	51
4.6	Debyesche Grenzfrequenz für <i>NaCl</i> ; Quelle: ???	56

5.1	Hall Sonde; Quelle: ???	63
5.2	Aufbau Photoelektronenspektroskopie; Quelle: ???	67
5.3	Darstellung des <i>PES</i> -Spektrums; Quelle: ???	68
5.4	<i>XPS</i> -Spektrum von Magnetit; Quelle: ???	68
5.5	Fermi-Fläche von <i>Cu</i> ; Quelle: ???	69
5.6	Fermi-Fläche von <i>Al</i> ; Quelle: ???	69

Index

- Überschusselektron, 26
- A.N. Holden, 22
- Absorbtion, 48
- Aerogels, 11
- Agnes, 49, 50
- akustischer Ast, 47
- Akzeptor, 75
- allgemeine Gitter, 16
- allotroper Strukturen, 7
- amorphe Festkörper, 7
- Anionenlücke, 26
- aperiodische Konstruktionsvorschrift, 10
- Ashcroft, 5
- Ast, akustischer, 47
- Ast, optischer, 47
- Atomformfaktor, 38
- Atomwellenfunktion, 64
- Band, verbotenes, 71
- Basis, 13
- bcc, 16, 17
- Bereich, energetisch erlaubt/verboten, 66
- Besetzungszahl, 52
- Blech, 10
- Blochzustände, 65
- body centered cubic, 16
- Boltzmann-Verteilung, 52
- Bragg, 34
- Bragg-Bedingung, 34
- Bragg-Formulierung, 34
- Bragg-Streuung, 65
- Bravais Gitter, 16
- Bremsstrahlung, Röntgen-, 33
- Brillouin-Zone, 29, 30, 43
- BZ, 43
- Caesiumchlorid, 23
- Cahn, 10
- Cottrell, 27
- Debye, 55
- Debye-Modell, 56
- Debye-Scherer-Verfahren, 40
- Debye-Temperatur, 55
- Debyesche Grenzfrequenzen, 56
- Defekt, Frenkel, 26
- Defekt, Schottky, 26
- Dermtröder, 5, 45
- Diamantstruktur, 25
- Dispersionsrelation, 44
- Dodekaeder, 30
- Donator, 75
- Dotierung, 75
- Drehung, 14
- Drude-Modell, 61
- Dulong-Petit'sche Gesetz, 51
- einfach Kubisch, 16
- Einheitszelle, 8
- Einkristall, 40
- Einstein-Modell, 51
- elastische Streuung, 36
- elektromagnetischer Strahlung, 33
- Elektronendichte, 64
- Elektronendichte, lokale, 35
- Elektronengas, entartet, 58
- Elektronenwellen, 33
- Elementarzelle, 15
- Emission, 48
- energetisch erlaubter Bereich, 66
- energetisch verbotener Bereich, 66
- Energie, Fermi, 58, 75
- Energieeigenwerte, 65
- Energielücke, 74
- entartetes Elektronengas, 58
- erste Brillouin-Zone, 29
- Ethen, 9

- Ewald-Konstruktion, 37
- F. Reinitzer, 9
- face centered cubic, 16
- fcc, 16, 17
- Fermi-Energie, 58, 75
- Fermi-Fläche, 69, 73
- Fermi-Kugeln, 59
- Fernordnung, 7
- fest, 6
- feste Körper, 6
- Festkörper, 7
- Festkörper, amorph, 7
- Fläche Pro Punkt, 54
- flächenzentriert Kubisch, 16
- Flüssigkeit, 6
- Freiheitsgrade, 54
- Fremdatomen, 75
- Frenkel, 26
- Frenkel-Defekt, 26
- Gas, 6
- Gasket, 11
- Generationsstrom, 77
- Gitter, reziprok, 28
- Gitterkonstante, 64
- Gitterpunktgruppen, 13
- Gittertranslationen, 13
- Gläser, 8
- gleichberechtigter Strukturen, 7
- Gratias, 10
- Grenzfrequenzen, Debyesche, 56
- Grenzladung, 76
- Grenzspannung, 76
- Gruppengeschwindigkeit, 44
- H.Raether, 41
- Hüpfleitfähigkeit, 70
- Hall-Sonde, 63
- Hall-Widerstand, 62
- harter Kugeln, 25
- hcp, 23
- hexagonal close-packed, 23
- hexagonale System, 16
- Hybridisierung, 25
- icosaedral, 10
- ikosaedrischer Symmetrie, 10
- Impuls eines Phonons, 48
- Impulsraum, 28
- Indizierung, 19
- Interferenz, konstruktive, 35
- Inversion, 14
- Kaliumbromid, 38
- Kaliumchlorid, 38
- Kittel, 5, 20
- klassisches Modell, 51
- Kochsalz, 20
- Konstruktion, Ewald, 37
- konstruktive Interferenz, 35
- kubisch Raumzentriert, 16
- kubische System, 16
- Kugel, Fermi, 59
- Kupfer, 57
- Löcher, 72
- langreichweitiger Ordnung, 7
- Langwelliger Grenzfall, 45
- Laue, 40
- Laue Gleichungen, 37
- Laue, Max von, 37
- Laue-Formulierung, 35
- LB, 73
- LCD, 9
- Leitungsband, 73
- Liquid-Chrystal-Display, 9
- lokalen Elektronendichte, 35
- longitudinal, 42
- Magnetit, 68
- Makromoleküle, 9
- Max von Laue, 37
- Mermin, 5
- Metallgläser, 8
- mittlere Teilchengeschwindigkeit, 56
- Modell, Einstein, 51
- Modell, klassisch, 51
- Molekülschmelze, niedrigmolekular, 8
- Nahordnung, 6
- Neutronen, 32
- Neutronen, thermisch, 34
- niedrigmolekulare Molekülschmelzen, 8
- Nullenergie, 75
- Nullpunktenergie, 52

Index

- optischer Ast, 47
- organische Verbindungen, 9
- Oxidgläser, 8

- P. Singer, 22
- Paarkorrelationsfunktion, 8
- Parallelepipet, 15
- Pauli-Prinzip, 58
- Phasenfaktor, 64
- Phasengeschwindigkeit, 44
- Phonon, Impuls eines, 48
- Phononen, 43, 47
- Photoemissionsspektroskopie, 67
- physikalisch äquivalent, 44
- Planks-Verteilung, 52
- Polymere, 8, 9
- Polymerisation, 9
- Polyvinylchlorid, 9
- primitive Elementarzelle, 15
- primitive Translationsvektoren, 22
- Punktgruppensymmetrie, 10
- Punktoperationen, 13
- PVC, 9

- Quasiperiodizität, 10

- Röntgen Bremsstrahlung, 33
- Röntgenröhre, 33
- Röntgenstrahlung, 32
- Raumdiagonale, 19
- Rekombinationsstrom, 77
- Relaxationszeit, 8
- reziprokes Gitter, 28

- Salzschmelzen, 8
- Saphir, 57
- sc, 16, 17
- Schottky, 26
- Schottky-Defekt, 26
- Schrödinger-Gleichung, 58, 64
- Selbstähnlichkeit, 11
- SGL, 64
- Shechtman, 10
- Sierpinski, 11
- Silica, 11
- single cubic, 16
- spezifische Wärme, 56
- Spiegelung, 14

- stehenden Welle, 65
- Streuung, 48
- Streuung, elastische, 36
- Streuvektor, 35
- Struktureinheit, 13
- Struktureinheiten, 13
- Strukturfaktor, 37
- Supraleiter, 61
- Symmetrieoperationen, 13
- Synchrotronstrahlung, 40
- synthetisiert, 9

- Teilchen, ultrarelativistische, 33
- thermische Neutronen, 34
- thermischen Gleichgewicht, 52
- TiC, 50
- Translationssymmetrie, 8
- Translationsvektor, 35
- Translationsvektoren, 13
- Translationsvektoren, primitive, 22
- transversal, 42
- Triklin, 16

- ultrarelativistische Teilchen, 33
- Umklappprozesse, 57

- Valenzelektronen, 66
- verbotene Band, 71
- Verfahren, Debye-Scherrer, 40
- Verteilung, Boltzmann, 52
- Verteilung, Plank, 52
- Volumen pro Zustand, 54

- Wärmeleitzahl, 56
- Wahrscheinlichkeitsdichte, 65
- Welle, stehend, 65
- Wellenvektor, 64
- Widerstand, Hall, 62
- Wigner-Seitz-Zelle, 15

- X- Rays, 32
- XPS-Spektrum, 68

- Zinkblende-Struktur, 71
- Zustandsdichte, 53, 59