



SchlangeWiki

FestkörperPhysik

zurück zu [AixDiplomThemen](#)

Bloch-Theorem

- Aus Periodizität des Gitterpotenzials und somit der Periodizität der Elektronendichte folgt, dass Elektronen durch Bloch-Wellen beschrieben werden müssen
- äquivalente Formulierungen:
 - $\psi_k(\vec{r}) = u_k(\vec{r})e^{i\vec{k}\vec{r}}$ mit Gitterperiodischer Funktion u_k
 - $\psi(\vec{r} + \vec{R}) = \psi(\vec{r})e^{i\vec{k}\vec{R}}$
 - man kann noch den Bandindex n dazuschreiben, mehrere u 's für ein k erlauben
 - $\psi'_{k+\vec{G}} = u' \cdot e^{i\vec{k}\vec{r}}$ mit $u' = u \cdot e^{i\vec{G}\vec{r}}$, d.h. man kann k auf erste Brillouinzone beschränken, wenn man mehrere Bänder zulässt => reduziertes Zonenschema

Tight-Binding-Näherung oder LCAO-Näherung, Bandstruktur

- Wellenfunktion ist Linearkombinationen aus Atomwellenfunktionen χ
 - $\psi_k(x) \sim \sum c_m(k)\chi(x - ma)$
- Damit Bloch-Theorem klappt, muss dann gelten:
 - $\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_m e^{ikma}\chi(x - ma)$
- Berücksichtigt man nur nächster-Nachbar-Wechselwirkung, so erhält man für die Energieerwartung
 - $E = E_A - \alpha - 2\gamma \cos(ka)$
 - Absenkung der Atomenergieniveaus um α
 - Versmierung mit k bei einer Bandbreite von 2γ

Schwaches Potenzial, Bandstruktur

- ausgehend vom freien Elektronengas
 - Elektron = ebene Welle
- schwaches Potenzial einschalten
- bei großen Wellenlängen kein Einfluss des Potenzials
- am Rand der Brillouinzone: Bragg-Reflexion
 - stehende Wellen; Aufenthaltswahrscheinlichkeiten $\sim \cos^2 \frac{\pi x}{a}$ und $\sim \sin^2 \frac{\pi x}{a}$
- diese beiden Zustände haben verschiedene Energien:
 - Energieabsenkung, wenn Aufenthaltswahrscheinlichkeit in Rumpfnähe groß, Energieerhöhung, wenn Aufenthaltswahrscheinlichkeit zwischen den Ionen groß
 - daher Bandaufspaltung im reduzierten Zonenschema
 - Breite der Bandlücke bei Aufspaltung an Bragg-Ebene zu reziprokem Gittervektor G ist proportional zur G -Fourierkomponente des Potenzials

Bänder allgemein

- in jedem Band $2N$ Zustände
- leere und volle Bänder leiten nicht, weil zu jedem k ein $-k$ existiert (Valenzband)
- teilweise besetzte Bänder heißen Leitungsband
 - Leiter haben teilweise besetzte Bänder, oder Überlapp VB-<>LB
 - Halbleiter und Isolatoren haben Bandlücke
 - bei Halbleitern thermische Anregung in LB, Bandlücke < 2 eV. Die resultierende Temperaturabhängigkeit der Besetzung überkompensiert die geringere Beweglichkeit bei höheren Temperaturen => höhere Leitfähigkeit bei höheren Temperaturen

Halbleiter

- Fermi-Energie in der Mitte zwischen höchstem besetztem und niedrigstem unbesetzten Zustand
- intrinsischer Halbleiter:
 - Zustandsdichte im Leitungsband: um Leitungsbandunterkante verschobene Zustandsdichte des freien Elektronengases mit effektiver Masse

$$D(E) = V/2\pi^2 (2m_e^*/\hbar^2)^{3/2} \cdot (E - E_L)^{1/2}$$
 - Effektive Masse: $m_e = \hbar^2 \left(\frac{d^2 E}{dk^2} \right)^{-1}$
 - wegen großem Abstand von der Fermikante: Boltzmannschwänze der Besetzungswahrscheinlichkeit. Besetzungszahl = "Nase mit Schwanz". Daraus Anzahl Löcher im VB und Anzahl Elektronen im LB:
 - $n = 2V (m_e^* kT / (2\pi \hbar^2))^{3/2} e^{E_L - E_F / kT}$
 - $p = 2V (m_i^* kT / (2\pi \hbar^2))^{3/2} e^{E_F - E_V / kT}$
 - mit $n=p$ folgt daraus: Fermi-Energie in der Mitte der Bandlücke
 - $\sqrt{np} \sim T^{3/2} e^{-E_g / (2kT)}$
- dotierter Halbleiter:
 - n -dotiert: Donatorniveau
 - p -dotiert: Akzeptorniveau
 - Fermikante zwischen Donator- / Akzeptorniveau und Leitungsbandunterkante / Valenzbandoberkante
- p - n -Übergang:
 - Diffusionsstrom => Rekombination => Verarmungszone => positive und negative Raumladungszonen => Feldstrom
 - im GG Feldstrom=Diffusionsstrom
 - Poissongleichung $-\frac{d^2 \phi}{dx^2} = \frac{dE}{dx} \sim \rho(x)$
 - bei konstanter Raumladung: linearer E-Feld-Verlauf, quadratischer Potenzialverlauf, Potenzialstufe ("Kontaktspannung")
 - im Bändermodell gleiche Fermienergie, stetiger Verlauf von Leitungsbandunterkante und Valenzbandoberkante

Wiki start

- PowerSearch
- UpdatedPages
- NewestPages
- ImagesGallery
- RecentChanges
- WordIndex
- PageIndex
- MostVisitedPages

Login:

Name:

Pw:

[Registrieren](#)

Vote:

Schlange des Jahres 2006	
Die Kuh Elsa	0
Der Chicken Pont Mann	1
Hans Dietrich Genscher mit Frau	0
Lucas	0
Ahörnchen und Behörnchen	0
Die deutsche FuBaNaMa	2

[alte Abstimmungen](#)

- Strom-Spannungskennlinie:
 - $I(U=0)=0$
 - Sperrrichtung: Sperrstrom, Durchbruch
- Breite des Übergangs:

$$d = \sqrt{\frac{2\epsilon\epsilon_0 U_D}{q} \left(\frac{1}{n_D} + \frac{1}{n_A} \right)}$$

Arten der Bindung

- kovalent:
 - 4-7 eV
 - gerichtet => Gitterstruktur
 - z.B. Diamant, Silizium, ...
- ionisch
 - 3,5 - 4 eV
 - nicht gerichtet
 - dichteste Kugelpackung mit Koordinationszahl 12 für optimale Raumfüllung
 - z.B. NaCl?, CsCl?
- metallisch
 - 2-4 eV
 - augedehnte Wellenfunktion
 - ungerichtet
- Wasserstoffbrücken
 - schwach: 0,1 eV
 - gerichtet
 - z.B. Eis
- Van-der-Waals
 - schwach: 0,1 eV
 - ungerichtet => dichteste Packung
 - kondensierte Edelgase

Madelung-Konstante

- gibt Verhältnis aus Bindungsenergie pro Ion im Gitter zur Bindungsenergie pro Ion im einzelnen Ionenpaar an
- $A = \sum_j \frac{\pm 1}{r_{ij}} R_{nN}$
 - R_{nN} ist der Abstand zum nächsten Nachbarn

Bravais-Gitter

- es kann nur 1-, 2-, 3-, 4- und 6-zählige Symmetrieachsen im Kristall geben
- 14 verschiedene
 - 7 durch Punktgruppen: triklin, monoklin, orthorombisch, tetragonal, hexagonal, rhomboedrisch, kubisch
 - dazu Raumgruppen (kubisch flächenzentriert, ...)
- An jedem Gitterpunkt ist die Basis, die mehrere Atome beinhalten kann

Eigenschaften einiger Gitter:

- bcc: (kubisch raumzentriert)
 - primitive Zelle: $a^*(-0,5,0,5,0,5)$; $a^*(0,5,-0,5,0,5)$; $a^*(0,5,0,5,-0,5)$
- fcc: (kubisch flächenzentriert) optimale Raumfüllung, Koordinationszahl 12, Stapelfolge ABCABC
 - primitive Zelle: $a^*(0,0,5,0,5)$; $a^*(0,5,0,0,5)$; $a^*(0,5,0,5,0)$
 - Beispiel: NaCl? (2atomige Basis), Kupfer
 - Diamantstruktur = 2 fcc Gitter um halbe Gitterkonstante gegeneinander verschoben oder fcc Gitter mit 2atomiger Basis aus identischen Atomen. Koordinationszahl 4
 - Zinkblende (ZnS) = wie Diamant, aber 2 verschiedene Atomsorten
- hcp: (hexagonal dichteste Packung, 2 einfach-hexagonale Gitter ineinander), Koordinationszahl 12, Stapelfolge ABAB, z.B. Co
- sc: einfach kubisch, z.B. CsCl? (2atomige Basis)

Elementarzelle

- konventionelle: volle Symmetrie, mehrere Gitterpunkte pro Zelle
- primitiv: kleinstmögliches Volumen, nur 1 Gitterpunkt pro Zelle
 - Wigner-Seitz-Zelle:
 - Raubereich um einen Gitterpunkt, der diesem Punkt näher ist als jedem anderen Gitterpunkt
 - Konstruktionsvorschrift: Verbindungslinien zu allen Nachbarn, auf halber Strecke dann senkrechte Flächen. Diese begrenzen dann die WSZ

Miller-Indizes (Gitterebenen)

- m_i Schnittpunkte der Ebene mit der i-Achse, $i=1,2,3$
- Miller-Indizes h,k,l sind p/m_i mit minimalem p , aber ganzzahlig
- Miller-Index 0 bedeutet: Diese Achse wird nicht geschnitten
- Querstrich für negativen Schnittpunkt

Madelungkonstante nochmal nachgucken

reziprokes Gitter

- Vektoren \vec{G} des Reziproken Gitters sollen $\vec{G}\vec{R} = 2\pi m$ für jeden Vektor \vec{R} des direkten Gitters erfüllen
- Dann kann jede gitterperiodische Funktion in eine Fourier-Reihe entwickelt werden: $\rho(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} \rho_{\vec{G}} e^{i\vec{G}\vec{r}}$
- Berechnung der Basisvektoren des RG:
 - $\vec{a}^* = 2\pi/V_E \cdot (\vec{b} \times \vec{c})$
 - $\vec{b}^* = \dots c \times a$
 - $\vec{c}^* = \dots a \times b$
 - dabei ist V_E = Volumen einer Zelle des direkten Gitters (Spatprodukt)
- $\vec{G} = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*$ steht senkrecht auf Ebene hkl
- Netzebenenabstand dieser Ebenen berechnet sich durch für sc-Gitter durch $d = 2\pi/|\vec{G}|$

Gitterdefekte

- Punktdefekte (Leerstellen, Zwischengitterplätze, Fremdatome)
- Liniendefekte (Stufenversetzung "Burgers-Vektor", Schraubenversetzung)
- Flächendefekte (Grenzflächen, Stabfehler, Korngrenzen)

Gitterschwingungen (Phononen)

- analog zur Born-Oppenheimer-Näherung wird der Einfluss der Valenzelektronen mit einem effektiven Ionenpotenzial berücksichtigt
- davon harmonische Näherung

in einer Dimension mit einatomiger Basis, N Gitterplätze:

- lineare Kette und nur nächster-Nachbar-Wechselwirkung führt auf

$$M \frac{d^2 u}{dt^2} = -c(2u(na) - u((n-1)a) - u((n+1)a))$$

- System gekoppelter DGLn für n Funktionen $u_n(t) = u(na, t)$
- Ansatz Ebene Welle $u(x = na, t) \sim e^{i(kna - \omega t)}$ führt auf
 - Dispersionsrelation $\omega(k) = 2\sqrt{c/m} \left| \sin \frac{ka}{2} \right|$
 - für kleine k ansatzweise lineare Dispersion, Gruppengeschwindigkeit=Phasengeschwindigkeit
 - $\omega(k=0) = 0$ Akustischer Zweig, transportiert Schallwellen
 - Gruppengeschwindigkeit verschwindet am Rand der Brillouinzone, stehende Welle mit minimaler Wellenlänge (alle Gitterpunkte schwingen gegenphasig)
- periodische Randbedingungen führen zu diskreten Werten von k und da u nur an Gitterplätzen definiert ist, kann k auf 1.BZ beschränkt werden =>

$$k = -\frac{\pi}{a}, -\frac{\pi}{a} \frac{N-2}{N}, \dots, \frac{\pi}{a}$$

mehratomige Basis

- optische Zweige, bei denen die Atome einer Basis gegenphasig schwingen (schwingende Dipole, die EM-Wellen absorbieren/emittieren können)
 - dort $\omega(k=0) \neq 0$

Drei Dimensionen, p-Atomige Basis

- 3 pN DGLn
- 3 akustische Zweige
 - 2 transversal
 - 1 longitudinal
- 3(p-1) optische Zweige
- auch hier durch endliche Kristallgröße und periodischen Randbedingungen diskrete, äquidistante Zustände im k-Raum
 - Zustandsdichte $D(k) = V/(2\pi)^3$

Wärmekapazität (phononischer Anteil)

- phononischer Anteil dominiert FK-Wärmekapazität, außer bei sehr kleinen Temperaturen
- klassisches Dulong-Petit-Gesetz $C_V = 3R$ (folgt aus Gleichverteilungssatz) gilt nur bei großen Temperaturen

Quantisierung in Phononen

- Gitterschwingungen sind harmonische Oszillatoren
- QM: $E = \hbar\omega(n + 1/2)$
 - Energie in jedem Oszillator nicht beliebig, sondern nur diskrete Werte erlaubt
 - Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren erzeugen und vernichten Phononen
 - Phononen sind Bosonen, Besetzungswahrscheinlichkeit $\frac{1}{e^{\hbar\omega/kT} - 1}$ (Bose-Einstein-Statistik)
- Phononen haben Quasiimpuls $\vec{p}_{\vec{k}} = \hbar\vec{k} + \vec{G}$, der bis auf reziproken Gittervektor definiert ist

Phononenzustandsdichte

- Definition $D(\omega)d\omega$ =Anzahl der Zustände im Intervall $d\omega$ um ω
- Normierung auf insgesamt 3pN Phononenzustände
- Zustandsdichte in ω aus Zustandsdichte in k:
 - $D_{\omega,s}(\omega) = \int \frac{D_{\vec{k}}(k)}{|\nabla_{\vec{k}}\omega|} dA$
 - Dann Summieren über alle Zweige $\omega = \text{const}$
- Summen über Zustände $\sum_{\vec{k},s}$ gehen in Integrale $\int d\omega D(\omega) \dots$ über:
 - z.B. Gesamtenergie (vgl. Plancksches Strahlungsgesetz): $U(T) = \int d\omega D(\omega) \hbar\omega \left(\frac{1}{e^{\hbar\omega/kT} - 1} + 1/2 \right)$
 - und daraus Wärmekapazität: $C_V = dU/dT$
- Einstein-Modell
 - nur ein ω erlaubt: $D(\omega) = 3pN\delta(\omega - \omega_E)$
 - vgl. optische Zweige
 - Einstein-Frequenz entspricht Einstein-Temperatur $\hbar\omega_E = k_B\theta_E$
 - Wärmekapazität
 - reproduziert Dulong-Petit für große Temperaturen
 - erfüllt "3. Hauptsatz" Wärmekapazität $\rightarrow 0$ für $T \rightarrow 0$
 - aber phononische Wärmekapazität bei kleinen T nicht $\sim T^3$, wie gemessen
- Debye-Modell
 - orientiert an dispersionsfreiem Grenzfall der akustischen Moden:
 - $D(\omega) = \frac{3pn}{\omega^3} \sim \omega^2$
 - Abbruch bei Debye-Frequenz, entspricht Debye-Temperatur ***Einstein-Frequenz entspricht Einstein-Temperatur $\hbar\omega_D = k_B\theta_D$
 - Wärmekapazität
 - $\sim T^3$ für kleine Temperaturen

Freies Elektronengas

- kein Drude-Modell behandelt

Sommerfeld-Modell

- freie Elektronen, Wellenfunktionen sind ebene Wellen
- endliche Größe des Kristalls => periodische Randbedingungen => diskrete k Werte im Abstand $2\pi/L$
 - Zustandsdichte im k-Raum $D(k) = 2 \cdot V/(2\pi)^3$ (Spin!)
- Dispersionsrelation $E = \hbar^2 k^2 / (2m)$

- Daraus Zustandsdichte im E-Raum: $D(E) = V/(2\pi)^2 \cdot (2m/\hbar^2)^{3/2} \sqrt{E} \sim \sqrt{E}$
- Fermikugel: Zustandsdichte im k-Raum * Volumen einer k-Raum-Kugel = Anzahl der Elektronen. Alle Zustände in dieser Kugel sind bei T=0 besetzt.
 - $k_F = (3\pi^2 n_e)^{1/3}$
 - $E_F = \hbar^2/2m \cdot k_F^2 = \frac{5}{3} \bar{E}$
 - Nur abhängig von der Elektronendichte. Messung z.B. über Hall-Effekt
 - degeneriertes Elektronengas, falls Fermienergie >> Temperatur

endliche Temperaturen (Besetzungsstatistik und Wärmekapazität)

- Elektronen sind Fermionen: $f(E, T) = \frac{1}{e^{(E-\mu)/kT} + 1}$ (Fermi-Dirac-Statistik)
 - Besetzungszahl $n(E, T) = D(E) \cdot f(E, T)$
 - Thermisches Aufweichen der Fermikante
 - chemisches Potenzial μ sinkt bei höheren Temperaturen, da Zustandsdichte bei hohen Energien höher und Fermi-Dirac-Verteilung symmetrisch um μ , es kämen also mehr besetzte Zustände rechts der Kante hinzu als links wegfallen, aber Teilchenzahlerhaltung
- Gesamtenergie der Elektronen bei T>0 $E_{ges} = \int dE E n(E, T)$
 - Wärmekapazität (elektronischer Beitrag) $C_V = \frac{\partial E}{\partial T} = \int dE E D(E) \frac{\partial f(E, T)}{\partial T} = \gamma T$
 - ~T, bei sehr kleinen Temperaturen größer als Phononenbeitrag
 - nur Elektronen nahe der Fermikante tragen bei

Experimentelle Methoden

Streuung

- kleine (De-Broglie)-Wellenlänge nötig, ca. 1 Angstrom
 - Röntgenstrahlung / Synchrotronstrahlung 12 keV
 - Neutronen (thermisch, 0,08 eV)
 - Elektronen 150 eV
- Gitterdefekte nicht erkennbar, da Streuung an vielen Atomen

theoretische quantenmechanische Beschreibung

- einlaufende ebene Welle
- auslaufende Kugelwelle mit Streuamplitude $f(\theta)$
- Streuwinkel θ oder Streuvektor $\vec{K} = \vec{k} - \vec{k}'$
 - falls elastische Streuung: $k = k'$
- 1. Bornsche Näherung: $f(\vec{K})$ ist Fouriertransformierte des Potentials, auch daran sieht man, dass man für räumlich kleine Strukturen große $|\vec{K}|$ braucht.
 - Streuquerschnitt $\frac{d\sigma}{d\Omega} \sim |f(\theta)|^2$
 - $f_a(\theta)$ Atomformfaktor ist ~ Fouriertransformierte des Atompotentials
 - $f_a(\theta)$ wird bei höheren Streuwinkeln kleiner (inkohärente Überlagerung der räumlich verteilten Streuzentren), an punktförmigen Streuzentren ist $f_a(\theta) = a = const$ ("Streulänge" a)
- Fouriertransformieren also das periodische Potenzial $V(\vec{r}) = \sum_j V_{a_j}(\vec{r} - \vec{r}_j)$
 - $f(\vec{K}) \sim \sum_j f_{a_j}(\vec{K}) \cdot e^{i\vec{K}\vec{r}_j}$
 - für $\vec{r}_j = \vec{R}_{n_1, n_2, n_3} + \vec{u}_j$ (Basisvektoren u, Gitterplätze R):
 - $f(\vec{K}) \sim \sum_j f_{a_j}(\vec{K}) e^{i\vec{K}\vec{u}_j} \cdot \sum_{n_1, n_2, n_3} e^{i\vec{K}\vec{R}}$
 - also Reflex, falls $e^{i\vec{K}\vec{R}} = 1$ für alle R, d.h. $\vec{K} = \vec{G}$ reziproker Gittervektor (Laue-Bedingung)
 - falls elastisch ist das äquivalent zu $\vec{k}\vec{G}/2 = (\vec{G}/2)^2$, also einlaufender Wellenvektor zeigt auf Bragg-Ebene. Das ist äquivalent zur bekannten Form $2d \sin(\theta) = m\lambda$ (Bragg-Bedingung. Die h,k,l in G sind nicht zwangsläufig durchgekürzt, daraus ergibt sich die Ordnung m als zusätzlicher Parameter)
 - für kubisches Gitter äquivalent zu $\sin^2(\theta) = \lambda^2/(4a)(h^2 + k^2 + l^2)$

Methoden der Röntgenstreuung

- Debye-Scherrer-Verfahren (Pulver, monochromatische Röntgenstreuung => Ringe)
- Drehkristall (Einkristall, monochromatische Röntgenstrahlung, Variiere Einfallsrichtung)
- Von-Laue-Verfahren (Einkristall, kontinuierliche Strahlung)

Mikroskopie

- einzelne Atome sichtbar, also auch Defekte

Feldionenmikroskop

- Metallspitze in He-Gas-Volumen mit starker Spannung
- hohe Felder an Spitze, dort Ionisation des He
- Ionen driften zum Schirm, Abbildung mit 10⁶-facher Vergrößerung

Transmissionselektronenmikroskop

- Durchstrahlung dünner Probe mit Elektronen (>100 keV)

Rastertunnelmikroskop

- Spannung zwischen Probe und metallischer Spitze
- kein direkter Kontakt
- Tunnelstrom
- Steuerung mit Piezos

Phononenspektroskopie

- "Raman- (Optische Phononen) oder Brillouin (Akustische Phononen) -Streuung"
- Messung der Phononenzustandsdichte und der Phononendispersion $\omega(\vec{k})$ durch inelastische Streuung von Neutronen
- inelastische Streuung = An- / Abregung von Phononen, dann
 - $\omega_g = \omega_0 \pm \omega(\vec{k})$
 - $\vec{k}_g - \vec{k}_0 \pm \vec{k} = \vec{G}$ (vgl. Laue-Bedingung)
 - entspricht Energie- und Quasiimpulserhaltung
- Messung der Dispersionsrelation durch Messung der Energieänderung als Funktion des Streuwinkels

Photoelektronenspektroskopie

- Messung der Besetzungszahl $n(E)$ über Häufigkeitsverteilung der kinetischen Energie von Photoelektronen $E_{kin} = hf - \text{Austrittsarbeit}(E)$

Herleitungen, die man vielleicht können sollte

- Raumfüllung von sc, bcc, fcc Gitter
- Bloch
- Bandbreite durch LCAO
- Bandaufspaltung durch schwaches Potenzial
- Streuung Strukturfaktor
- Laue = Bragg
- Rechnen mit Zustandsdichten
- Fermi-Energie
- warum reziprokes Gitter (Fourierentwicklung periodischer Funktionen)
- warum Fermienergie in der Mitte der Bandlücke
- warum Fermienergie temperaturabhängig

[EditThisPage](#) [BackLinks](#) [PageInfo](#) [page control](#) last changed on Tue Feb 13 15:40:01 2007

SchlangeWiki - Studieren in Aachen - SchlangeWiki basiert auf [ErlurtWiki](#)

[Druckansicht](#)

