

$k_B \cdot T$ bei Raumtemperatur : 25 mEV

1. Chemische Bindungen u. Kristallstruktur

Atom - Molekül - Festkörper (Einkristall)

$$QM: \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(r), \vec{r} = r \cdot \hat{e}_r$$

(zentralpotential)

Drehimpuls ist erhalten

$$\frac{d}{dt}(\vec{r} \times \vec{p}) = \vec{r} \times \frac{d\vec{p}}{dt} + \vec{r} \times \frac{d\vec{r}}{dt} = 0$$

da $\vec{r} \parallel \vec{p}$

Aufspaltung der Hamiltonfunktion in radikal Anteil und Drehimpuls - Anteil

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{L^2}{2mr^2} + V(r) \right] \Psi(r, \theta, \varphi) = E \Psi(r, \theta, \varphi)$$

$$\text{Separation: } \Psi = R_{nl}(r) \cdot Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

$$L^2 Y_{lm}(\theta, \varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

$$\rightarrow \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r) \right] R_{nl}(r) = E R_{nl}(r)$$

Ansatz:

$$R_{nl}(r) = \frac{U_{nl}(r)}{r} \quad \begin{cases} U_{nl}(r) = e^{-kr} \cdot r^{l+1} (a_0 + a_1 r + \dots) \\ E_n = \frac{\hbar^2 l^2}{2m} \end{cases}$$

Polygonal $(n-l-1)$ -ter Ordnung

\rightsquigarrow Laguerre-Polynome $L_{n-l}^{2l+1}(r)$

$$n = N + l + 1, \quad N = 0, 1, 2, \dots$$

$$\rightsquigarrow l = 0, 1, \dots, (n-1)$$

↑
Anzahl der Nullstellen!

Energieniveaus

$$E = E_0 \sim - \frac{13,6 \text{ eV} \cdot Z}{n^2 \cdot \epsilon^2}$$

Korrektur der Energieniveaus

- Relativistische Korrektur

$$\frac{\Delta E}{E} \sim \frac{v^2}{c^2} \sim \alpha^2 Z^2, \quad \alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \approx \frac{1}{137}$$

kin. Energie: $E = \sqrt{m^2 c^4 + p^2 c^2}$
 $\sim m c^2 \left(1 + \frac{1}{2} \frac{p^2}{m^2 c^2} \left(1 + \frac{1}{4} \frac{p^2}{m^2 c^2} + \dots \right) \right)$

- Spin-Bahn-Kopplung

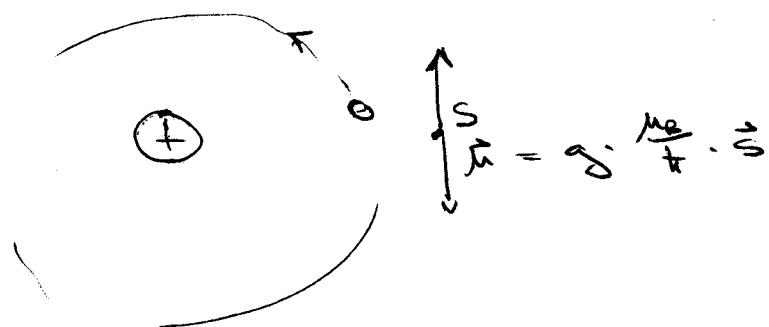
(auch relativistisch: aus der Diracgleichung)

Spin alleine ist nicht ortsgereichtet/gebunden.
Erst die SBK legt Anisotropien fest

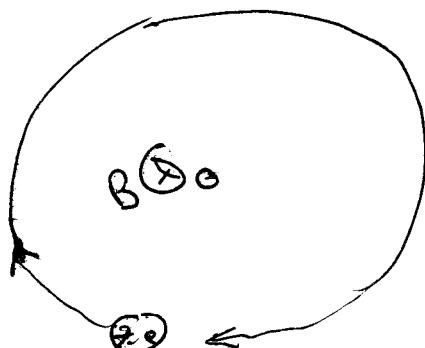
- Darwin-Term

Spin-Bahnkopplung

z.B. 4.06



Transformation ins System
des Elektrons



$$\text{Gesamtspinimpuls} : \vec{J} = (\vec{L} + \vec{S})^2 = L^2 + S^2 + 2LS$$

mit Eigenwerten $\langle \vec{J}^2 \rangle = \hbar^2 j(j+1)$

Hundsche Regeln

1. S maximal $(\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow)$

Symmetrische Wellenfunktion \rightarrow Minimierung der Coulomb-Wechselwirkung

2. L maximal

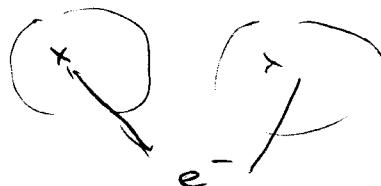
3. $J = |L - S|$ für nicht mehr als halbgefüllte Schale
Betrachtung als: leere Schale mit aufgefüllten e^-

4. $J = |L + S|$ für mehr als halbgefüllte Schale
Betrachtung als: volle Schale mit Löchern

H_2^+ -Ion: kovalente Bindung

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{Z_A e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_A|} - \frac{Z_B e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_B|} + \frac{Z_A Z_B e^2}{|\mathbf{r}_A - \mathbf{r}_B|}$$

\Rightarrow Praktikumsproblem
nicht mehr exakt
lösbar!



Ausatz: $\psi = c_A \psi_A + c_B \psi_B$

"Linear combination
of atomic orbitals"
LCAO

$$\Rightarrow E = \frac{c_A^2 - E_A + c_B^2 E_B + 2c_A c_B H_{AB}}{c_A^2 + c_B^2 + 2c_A c_B S} \quad \leftarrow \text{Normierung}$$

$$\frac{\partial E}{\partial c_A} \stackrel{!}{=} 0 \quad ; \quad \frac{\partial E}{\partial c_B} \stackrel{!}{=} 0$$

$$\therefore 2c_A(E_A - E) + 2c_B(H_{AB} - ES) = 0$$

$$2c_B(E_B - E) + 2c_A(H_{AB} - ES) = 0$$

$$\begin{pmatrix} \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} c_A \\ c_B \end{pmatrix} = 0$$

$$\Rightarrow \det \begin{pmatrix} \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot \end{pmatrix} = 0$$

\Rightarrow quadratische Gleichung für E

$$\Rightarrow E_1 = E_2 \quad ; \quad E_{\pm} = \frac{E_A \pm H_{AB}}{1 \pm S}$$

$$\gamma_{+} = \frac{\gamma_A + \gamma_B}{\sqrt{2(1+S)}} \quad \gamma_{-} = \frac{\gamma_A - \gamma_B}{\sqrt{2(1-S)}}$$

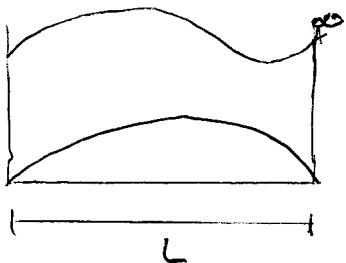
H_{AB} : Wechselwirkungsenergie

S : Überlappintegral

Metallische Bindung

Delokalisierung der Valenzelektronen (s, p -Elektronen)

→ Energieniedrigung (min. Energie \uparrow) $\Delta p \cdot \Delta x = h$



$$n \cdot \frac{\pi}{2} = L$$

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{k^2}{2m L^2} = \frac{k^2}{8mL^2} \cdot n^2$$

$$k = n \cdot \frac{\pi}{L}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \text{ quantisiert}$$

└ Volumen im Impulsraum

Feste Randbedingungen

Metalle : hohe Packungsdichte würde man erwarten, ist aber nicht der Fall :

d-Metalle : Fe (bcc), Co(hcp), Ni (fcc)

Bravais-Gitter

math. Def: $\vec{R} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3; n_i \in \mathbb{Z}; \vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ nicht kollinear

Ostvektoren \vec{R} definieren ein unendlich ausgedehntes Punktgitter

\vec{a}_i : primitive Vektoren, $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ spannen die primitive Einheitszelle auf

alternativ: Ein Feld unendlich vieler Punkte, deren Anordnung und Ausrichtung von jedem Punkt aus gleich aussieht

Primitive Gitter

bcc:

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2}(1, -1, -1)$$

$$\vec{a}_2 = \frac{a}{2}(1, 1, 1)$$

$$\vec{a}_3 = \frac{a}{2}(-1, -1, 1)$$

$$\Rightarrow V_{\text{el}} = \vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3) = \frac{a^3}{2} \quad ; \quad k_2 = 8$$

fcc:

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2}(1, 1, 0)$$

$$\vec{a}_2 = \frac{a}{2}(1, 0, 1)$$

$$\vec{a}_3 = \frac{a}{2}(0, 1, 1)$$

4 Atome / Würfel
 $\Rightarrow V_{\text{el}} = \frac{a^3}{4}$

Koordinationszahl = Zahl der nächsten Nachbarn

$$k_2 = 12$$

Wigner-Seitz-Zelle: ~~Die Zelle, die den Raum~~
 Der Anteil des Raums, der am nächsten zu einem
 Gitterpunkt liegt
 Konstruktion über die Ebene der Mittelsenkrechten der
 Verbindungsstrecken zwischen den Atomen

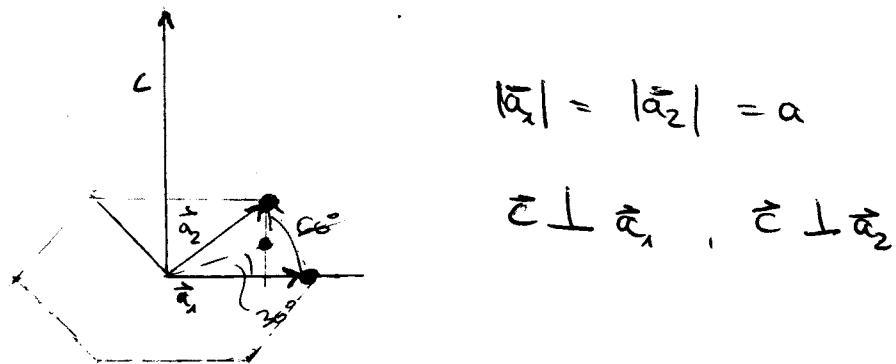
Kristallstrukturen

Bravais - Gitter + Basis

Basis: Atom - od. Molekülgruppe, die wir einem Gitterpunkt zuordnen.

Bsp.: hcp - Gitter

Bravais - Gitter: hexagonal



$$|\vec{\alpha}_1| = |\vec{\alpha}_2| = a$$

$$\vec{c} \perp \vec{\alpha}_1, \vec{c} \perp \vec{\alpha}_2$$

dichte Kugelpackung, Stapelfolge ABAB . . .

$$\begin{aligned} \text{Basisvektoren: } \vec{t}_1 &= 0 ; \vec{t}_2 = \left(\frac{a}{2}, \frac{a}{2} \tan 30^\circ, \frac{c}{2} \right) \\ &= \left(\frac{a}{2}, \frac{a}{2\sqrt{3}}, \frac{c}{2} \right) \end{aligned}$$

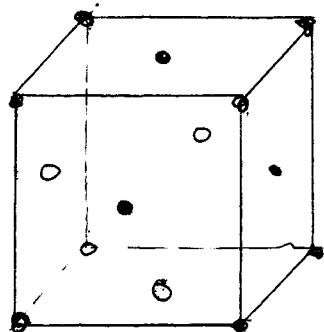
$$2R = a = |\vec{t}_2|$$

$$\Rightarrow 2a = \sqrt{a^2} = 1,632.99$$

Rauheitsfüllung: - -

Bsp 2: Diamant

fcc - Bravais - Gitter

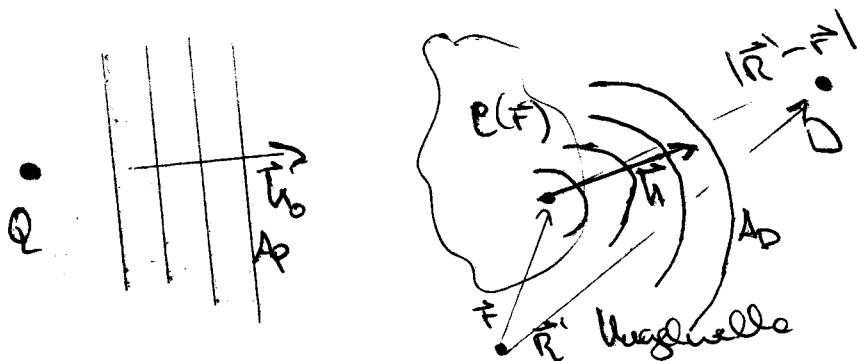


$$\text{Basis: } \vec{t}_1 = \vec{0}$$

$$\vec{t}_2 = \left(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}\right)_a$$

$\Rightarrow Z_{\text{BS}}, g_x, t_1, g_F$

Braggung an periodischen Strukturen



Q: Quelle: Photonen, X-rays, Röntgenstrahlung,
Neutronen, He-Atome, Elektronen

de Broglie \Rightarrow Wellencharakter 1 \AA

Elektronen: 100 eV

Photonen: 20 keV ($h\nu$)

He-Atome: 50 meV ($\frac{1}{2} h\nu$)

$\rho(\vec{r})$ Strenndichte

$$A_p = A_0 \cdot e^{i\vec{k}_0 \cdot \vec{r}} \quad ; \quad A_0 = A \cdot e^{-i\omega_0 t}$$

$$A_D = A_p \rho(\vec{r}) \frac{e^{i\vec{k}(\vec{R}' - \vec{r})}}{|\vec{R}' - \vec{r}|}$$

Kugelwelle mit
Normierung (Ausdiminution
der Intensität mit $R' \rightarrow \text{distanz}$ mit R')

Näherung $R' \gg r$ (Detector weit weg)

\vec{k} hat nur eine Richtung (kleines Target)

$$\Rightarrow A_D = A_p \rho(\vec{r}) \frac{e^{i\vec{k}(\vec{R}' - \vec{r})}}{R'}$$

$$= A_0 \rho(\vec{r}) \frac{e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}'}}{R'} \cdot e^{i(\vec{k}_0 \cdot \vec{r} - \vec{k} \cdot \vec{r})}$$

Strenintensität:

$$I \propto |A_D|^2 \propto \left| \frac{A_0}{R'} \right|^2 \cdot \left| \int_{\text{Vol}} d^3r \rho(r) e^{i(\vec{k}_0 - \vec{k}) \cdot \vec{r}} \right|^2$$

$$\vec{k} := -\vec{k}_0 + \vec{k}$$

Übergang von
Intensitätsdichte
zu Intensität
 $\rightarrow S d^3r$

$$I \propto \left| \int_{\text{Vol}} d^3r \rho(r) \cdot e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \right|^2$$

\Rightarrow • Fouriertransformation der Strenndichte ergibt die Intensität

- $\omega = \omega_0$, getriebener harmonischer Oszilator
 \rightarrow elastische Strennung

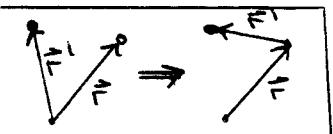
- λ muss in der Größenordnung von typischen Abständen (Gitterabstände) sein.

Stand: $I \sim |e(r)|^2$ keine Strukturinformation

- ruhende Probe, Mittelwerte über die Zeit
- nur Einfachstreuung betrachtet, gestraute Welle - wellen streuen nicht nochmal ("kinematische Näherung")
- e kann von der Energie, d.h. $|k|$ abhängen
- e kann komplex sein: die gestraute Welle hat eine Phasenverschiebung oder Absorption

$$I \propto S d^3 r e(\vec{r}) e^{-i \vec{k} \vec{r}} \cdot S d^3 r' e^*(\vec{r}') e^{i \vec{k} \vec{r}'}$$

$$\begin{aligned} & \stackrel{e \text{ real}}{=} \int d^3 r e(\vec{r}) e^{-i \vec{k} \vec{r}} \int d^3 r' e^*(\vec{r}' + \vec{r}) e^{i \vec{k} (\vec{r} + \vec{r}')} \\ & = \int d^3 r' e^{i \vec{k} \vec{r}'} \underbrace{\int d^3 r e(\vec{r}) e(\vec{r} + \vec{r}')}_{P(\vec{r}')} \end{aligned}$$



$$P(\vec{r}') = \int d^3 r e(\vec{r}) e(\vec{r} + \vec{r}')$$

Patterson-Funktion

$P(\vec{r}') \neq 0$, wenn \vec{r}' einen Abstand zwischen Strukturen entspricht

Die Intensität ist die Fouriertransformierte der Patterson-Funktion

Dreidimensional periodischer Festkörper

$$\text{Struktur} \rho(\vec{r}) = \rho(\vec{r} + \vec{R}_n) \\ = \rho(\vec{r} + u_1 \vec{a}_1 + u_2 \vec{a}_2 + u_3 \vec{a}_3)$$

gitterperiodisch!

$$\int \rho(\vec{r}) \cdot e^{-i\vec{k}\vec{r}} d^3r = \int \rho(\vec{r} + \vec{R}) \cdot e^{-i\vec{k}(\vec{r} + \vec{R})} d^3r \\ = \int \rho(\vec{r}) \cdot e^{-i\vec{k}\vec{r}} \underbrace{\cdot e^{-i\vec{k}\vec{R}}}_{=1}$$

$$e^{-i\vec{k}\vec{R}} = 1$$

$$\boxed{\vec{k} \cdot \vec{R} = 2\pi n}$$

$$\vec{k} = \vec{k}_1 - \vec{k}_0$$

$$\vec{k}_1 \cdot \vec{a}_1 = 2\pi h$$

$$h, k, l \in \mathbb{Z}$$

$$\vec{k}_1 \cdot \vec{a}_2 = 2\pi k$$

$$\vec{k}_1 \cdot \vec{a}_3 = 2\pi l$$

$$\vec{k} = h \cdot \vec{q}_1 + k \cdot \vec{q}_2 + l \cdot \vec{q}_3 \quad \text{spezielle Lsg.}$$

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

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

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

$$\vec{q}_1 = 2\pi \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{|\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)|} = 2\pi \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{V_{\text{ez}}}$$

$$\vec{q}_2 = 2\pi \frac{\vec{a}_3 \times \vec{a}_1}{V_{\text{ez}}}$$

$$\vec{q}_3 = 2\pi \frac{\vec{a}_1 \times \vec{a}_2}{V_{\text{ez}}}$$

Lane - Bedingung

10.5.06

$$\vec{t}_l = \vec{t}_h - \vec{t}_o = \vec{g} \quad \hat{=} 3 \text{ Bedingungen}$$

gilt auch für Mehrfachstruktur (hier gezeigt für Einfachstruktur)

elastisch : $\omega = \omega_0$
 $|\vec{t}_h| = |\vec{t}_{h_0}|$

$$|\vec{g}| = |\vec{t}_h - \vec{t}_o| \leq 2|\vec{t}_o|$$

endliche Zahl von Reflexen

Bragg - Bedingung

15.5.06

lässt sich aus der Lane - Bedingung herleiten

$$\rightarrow n \cdot \lambda = 2d \cdot \sin \vartheta$$

$$d_{hkl} = \frac{2\pi}{|\vec{g}_{hkl}|}$$

h, k, l : Miller-Indizes

$$(h, k, l) = p \cdot \left(\frac{1}{n_1}, \frac{1}{n_2}, \frac{1}{n_3} \right) ; p = \text{Gesamtlängsfaktor}$$

wenn $n_1 a_1 + n_2 a_2 + n_3 a_3$ im Realgitter

Notation

(100) Ebene

$\{100\}$ umge alle symm. äquiv. Fl.

$= \{(100), (0,10), (001), \dots\}$

→

$$[100] = 1 \cdot a_1 + 0 \cdot a_2 + 0 \cdot a_3 \quad \text{Richtung}$$

$$\langle 100 \rangle = \{ [100], [010], [001], \dots \}$$

Reflexintensitäten

$$J(\vec{h}, \vec{k}_0) = S(\vec{k}) = \left| \frac{A_0}{R} \right|^2 \cdot \left| \int d^3r \rho(r) e^{i\vec{k}\vec{r}} \right|^2$$

$$= N^2 \left| c_g \right|^2$$

Fouriertransformation der Strändichte

c_g Fourierkoeffizient der Strändichte zum reziproken Gittervektor \vec{g}

Wann ρ reell:

$$J_{h\bar{k}\bar{l}} = J_{hkl}$$

Inversionsymmetrie
→ Beugungsbild
(Friedelsche Regel)

Gitter mit Basis

$$c_g = \frac{1}{V_B} \sum_{\alpha} e^{-i\vec{g}\vec{a}_{\alpha}} \underbrace{\int d^3r' \rho_{\alpha} e^{-i\vec{g}\vec{r}'}}_{\text{Formfaktor } f_{\alpha}}$$

Formfaktor: Strändichte d. Einzelatoms

Röntgenstreuung: $f_{\alpha} \sim Z$ (Z Ladung $\hat{=} \text{Zahl der Elektronen}$)

$$e_g = \frac{1}{V_{BZ}} \sum_{\alpha} e^{-ig \mathbf{t}_{\alpha} \cdot \mathbf{f}_{\alpha}}$$

(Struktur faktor)

Formfaktor:

$$\sum_{\alpha} \int_0^{\infty} \int_0^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \underbrace{e_{\alpha}(r')}_{\text{Atom}} e^{-igr' \cos \vartheta} r'^2 dr' \underbrace{\sin \vartheta d\vartheta dr'}_{-d(\cos \vartheta)}$$

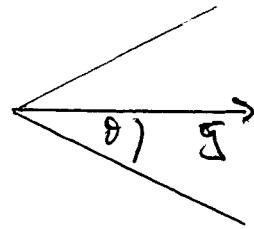
$$= 2\pi \sum_{\alpha} \int_0^{\infty} f_{\alpha}(r') e^{-igr' \cos \vartheta} \cos \vartheta r'^2 dr'$$

$$= -2\pi \frac{e^{-igr'} - e^{+igr'}}{igr'} r'^2 dr'$$

$$= 4\pi \int \frac{\sin(gr')}{gr'} r'^2 dr'$$

$$g = 2 |k_0| \cdot \sin \vartheta$$

$$= \frac{4\pi}{2} \cdot \sin \vartheta$$



$$f_{\alpha} = \int r'^2 p_{\alpha}(r') \frac{\sin(4\pi r' \frac{|k_0| \sin \vartheta}{2} \sin \frac{\vartheta}{2})}{4\pi r' \sin \frac{\vartheta}{2}} dr'$$

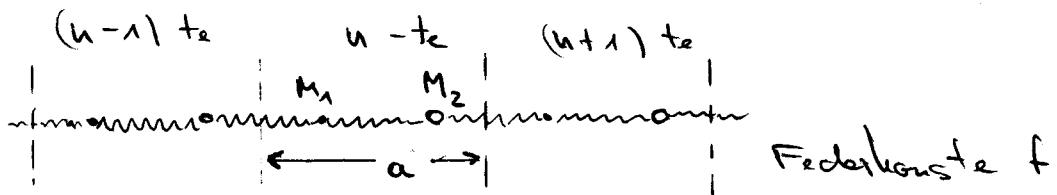
$$\sim \frac{\sin x}{x}; x \rightarrow 0 \text{ max}$$

$\vartheta \rightarrow 0$ Vorrätsstreuung

Gitterschwingung

Die lineare Kette von Atomen

2 Atome M_1 M_2 (Beispiel)



(harmonische Näherung)

$$M_1 \ddot{s}_{n_1} + 2f s_{n_1} - f s_{n_2} - f s_{n-1,2} = 0$$

$$M_2 \ddot{s}_{n_2} + 2f s_{n_2} - f s_{n_1} - f s_{n+1,1} = 0$$

\Rightarrow homog. Dgl. mit konst. Kraft.

Ausatz: $s_{n\alpha} = \frac{1}{\sqrt{M_\alpha}} u_\alpha(q) e^{i(qna - \omega t)}$

Eine Welle mit Wellenvektor q , definiert nur an den Gitterpunkten $n\cdot a$

$u_\alpha(q)$ kann komplex sein \rightarrow Dämpfung, Phasenfaktor

$\omega(q)$ Dispersionsrelation

$\hat{=}$ Zusammenhang zwischen Energie ϵ und Wellenvektor q

$$\frac{m_1}{\sqrt{M_1}} u_1 \omega^2 e^{i(qna - \omega t)} + \frac{2fu_1}{\sqrt{M_1}} e^{i(qna - \omega t)} - \frac{fu_2}{\sqrt{M_2}} e^{i(q(n-1)a - \omega t)} = 0$$

$$-u_1 \omega^2 + \frac{2f}{M_1} u_1 - \frac{f}{\sqrt{M_1 M_2}} \cdot u_2 - \frac{f}{\sqrt{M_1 M_2}} u_2 e^{-iqa} = 0$$

$$-u_1 \omega^2 + \frac{2f}{M_1} u_1 - \frac{fu_2}{\sqrt{M_1 M_2}} (1 + e^{-iqa}) = 0$$

analog:

$$-u_2 \omega^2 + \frac{2f}{M_2} u_2 - \frac{fu_2}{\sqrt{M_1 M_2}} (1 + e^{-iqa}) = 0$$

$$\begin{pmatrix} \frac{2f}{m_1} - \omega^2 & -\frac{f}{\sqrt{M_1 M_2}} (1 + e^{-iqa}) \\ -\frac{f}{\sqrt{M_1 M_2}} (1 + e^{-iqa}) & \frac{2f}{M_2} - \omega^2 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} = 0$$

$$\det = 0$$

$$\rightarrow \omega^4 + \left(\frac{2f}{m_1} + \frac{2f}{m_2} \right) \omega^2 + \frac{4f^2}{m_1 m_2} - \frac{4f^2}{m_1 m_2} \cos^2 \frac{qa}{2} = 0$$

$$\rightarrow (\omega_{1,2})^2 = \frac{f}{m_1} + \frac{f}{m_2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{\left(\frac{2f}{m_1} + \frac{2f}{m_2} \right)^2 - \frac{4 \cdot 4 f^2}{m_1 m_2} \sin^2 \frac{qa}{2}}$$

$$= f \left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \pm \sqrt{\left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right)^2 - \frac{4}{m_1 m_2} \sin^2 \frac{qa}{2}} \right)$$

$$\frac{1}{M} = \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \quad \text{reduzierte Masse}$$

$\omega_{1,2}^2$ zweitlg zu einem q: akustisch und optisch

Spezielle Lösungen:

$$q=0 : \quad \omega_{N_2}^2 = \begin{cases} 2f \left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right) = \frac{2f}{\mu} \\ 0 \end{cases}$$

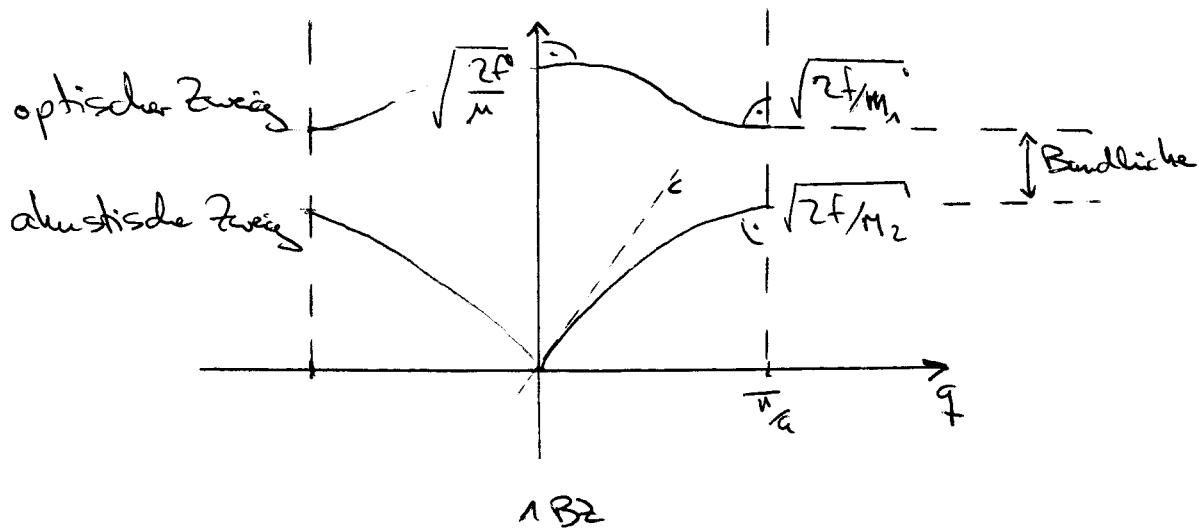
stehende Welle,
da keine Ausbreitung

$$q = \frac{\pi}{a} : \quad \sin^2 \frac{\pi}{2} = 1, \quad \Gamma .. = \sqrt{\left(\frac{1}{M_1} - \frac{1}{M_2} \right)^2}$$

(Brillouin-Zonen-Rand)

$$\rightarrow \omega_{N_2}^2 = \begin{cases} 2f/M_1 \\ 2f/M_2 \end{cases} \quad \text{wenn } \frac{2f}{M_1} > \frac{2f}{M_2}; M_1 < M_2$$

$$\omega(q) = \omega\left(q + \frac{2\pi}{a}\right) : \omega(q) = \omega(-q)$$



c: Steigung der Geraden $\frac{d\omega}{dq}$ für kleine q ist die Schallgeschwindigkeit

Gruppengeschw. $\frac{d\omega}{dt} = v_g$

$$q=0, q = \pm \frac{\pi}{a} \cdot n : v_g = 0 \quad \text{stehende Welle}$$

q ist der Wellenvektor der Eigenschwingung

q ist nicht mehr der Impuls, sondern der "Kristallimpuls"
(da $v_g = \frac{d\omega}{dt}$)

q Kristallimpuls \neq physikal. Impuls

$\omega(q)$ Eigenfrequenz

eig. Phasenänderung von einer Zelle zur nächsten

Bsp.: $q=0$ Phase konst.

(miteinander schwinger)

$$q = \frac{\pi}{a} \quad \begin{matrix} \text{Phase } +1, -1, +1 \\ u = 0, \frac{\pi}{a}, \frac{2\pi}{a} \end{matrix} \quad (\text{gegenseitig-} \atop \text{schwingen})$$

$$\text{maximalfrequenz } \omega_{\max} = \sqrt{2f \left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right)}$$

2 Zweige: 2 Atome/EZ

longitudinale Zweige: L_A $\hat{=} \text{Wellevektor } q \parallel \text{Auslenkung } u$

Lösungen für u_1, u_2 ($u = \text{Amplitude}, s = \text{Auslenkung}$)

- $q=0, \omega=0$; $\frac{2f}{M_1} u_1 - \frac{2f}{\sqrt{M_1 \cdot M_2}} \cdot u_2 = 0$

$$\rightarrow \frac{u_1}{u_2} = \sqrt{\frac{M_1}{M_2}} \Rightarrow s_{u_1} = s_{u_2}$$

$$\omega = \sqrt{2f \left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right)} - \frac{2f}{M_2} u_1 - \frac{2f}{\sqrt{M_1 M_2}} u_2 = 0$$

$$\frac{u_1}{u_2} = -\frac{\sqrt{M_2}}{\sqrt{M_1}} \quad \frac{s_{u_1}}{s_{u_2}} = -\frac{M_2}{M_1}$$

Atome schwingen gegenseitig, Schwerpt. konst.

- $q = \frac{\pi}{a}; \omega = \sqrt{\frac{2f}{M_2}}$ $u_1 = 0$

$$\omega = \sqrt{\frac{2f}{M_1}} \quad u_2 = 0$$

Entwicklung für kleine q :

$$\sqrt{..} = \left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right) \sqrt{1 - \frac{4m_1 m_2}{(m_1 + m_2)^2} \cdot \sin^2 \frac{qa}{2}}$$

$$\sin x \sim x$$

$$= \left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right) \left(1 - \frac{1}{2} \frac{4m_1 m_2}{(m_1 + m_2)^2} \left(\frac{qa}{2} \right)^2 \right)$$

$$\omega_2^2 = \frac{2f}{m_1 + m_2} \left(\frac{qa}{2} \right)^2$$

$$\omega_2 = \underbrace{\sqrt{\frac{2f}{m_1 + m_2} \cdot \frac{a}{2}}} \cdot q \\ = c \text{ Schallgeschwindigkeit}$$

Rückführung makrosk. Größe c auf mikroskopische Größen M_i, f, a

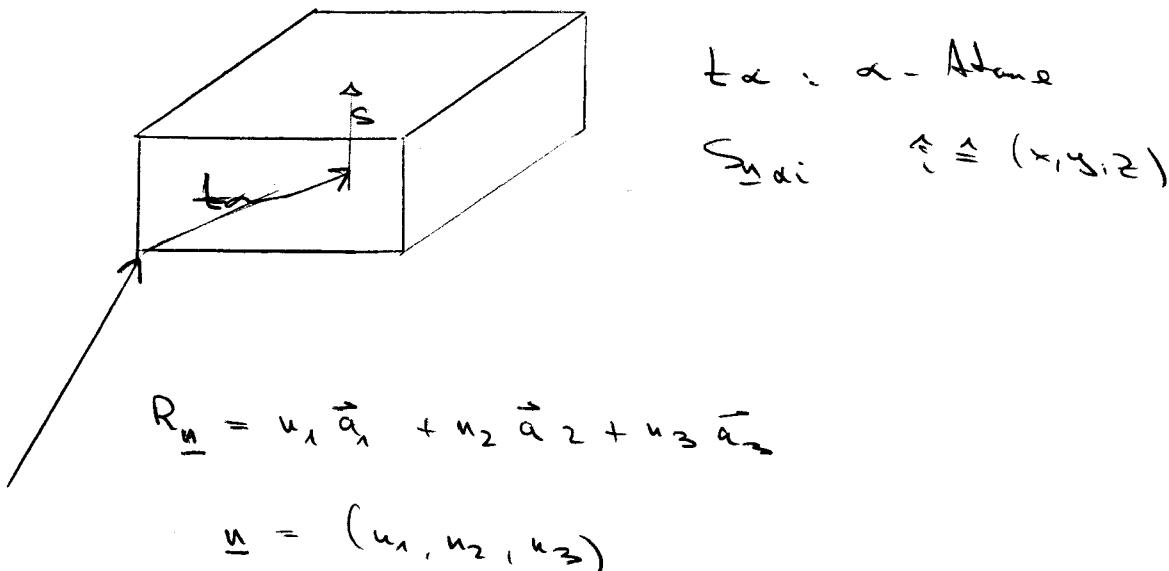
$$\omega = c \cdot q \text{ akust. Zweig}$$

$$\omega \neq 0; q = 0 \text{ opt. Zweig}$$

$$c \sim 10^3 \text{ m/s} \quad q = \frac{\pi}{a} \sim 1 \text{ A}^{-1} \quad \omega \sim 10^{13} \text{ Hz (THz)}$$

$$\hbar \omega \sim 40 - 60 \text{ meV}$$

- Gitterschwingungen in 3 Dimensionen



$$m_\alpha s_{\alpha\alpha i} + \sum_{m\beta_j} \phi_{\alpha\alpha i}^{m\beta_j} s_{m\beta_j} = 0$$

welche Federkonstanten ϕ ?

→ Gesamtenergie des Kristalls

$$u = u_0 + \frac{\partial u}{\partial r_{\alpha i}} \left| \begin{array}{l} \cdot s_{\alpha\alpha i} \\ \text{gleich-} \\ \text{gewicht} \end{array} \right. + \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2 u}{\partial r_{\alpha i} \partial r_{m\beta_j}} \right|_{\text{gew}} s_{\alpha\alpha i} s_{m\beta_j}$$

$$r = R + t + s + \cancel{O(\beta)}$$

\swarrow harm. Näherung

$$\phi_{\alpha\alpha i}^{m\beta_j} = \left. \frac{\partial^2 u}{\partial r_{\alpha i} \partial r_{m\beta_j}} \right|_{\text{gew}}$$

$$\text{Ansatz: } u_{\alpha i} = \frac{1}{\sqrt{M_\alpha}} u_{\alpha i}(q) e^{i(\vec{q} \cdot \vec{R}_m - \omega t)}$$

Eingesetzt in $\rightarrow -\omega^2 u_{\alpha i}(q) + \sum_{\beta} \frac{1}{\sqrt{M_\alpha M_\beta}} \phi_{\alpha i}^{\beta} e^{iq(R_m - R_n)} u_{\beta j}(q) = 0$

hängt nur von $R_m - R_n$ ab

$$\text{BdA: } R_n = 0$$

$$\rightarrow -\omega^2 u_{\alpha i}(q) + \sum_{\beta} \left(\sum_m \frac{1}{\sqrt{M_\alpha M_\beta}} \phi_{\alpha i}^{m \beta} e^{iq R_m} \right) u_{\beta j}(q) = 0$$

$\underbrace{\quad}_{\text{Dynamische Matrix}}$
 $D_{\alpha i}^{\beta j}(q)$

$$\text{Lösung: } \det(D_{\alpha i}^{\beta j}(q) - 1 \omega^2) = 0$$

N_α : Zahl d. Atome / EZ

$3 N_\alpha \times 3 N_\alpha$ Matrix: $3 N_\alpha$ -Zweige

$$\det \text{Polynom: } (\omega^2)^{3N_\alpha}$$

3 akustische Zweige

$3(N_\alpha - 1)$ optische Zweige

$$R_m = -R_m; q \rightarrow -q; \omega(q) = \omega(-q)$$

$$\omega(q+g) = \omega(q) \text{ da } g \cdot R_m = 2\pi$$

g reziproker Gittervektor

Photonen: Raman - Streuung

$$\lambda \sim 500 \text{ nm} ; \frac{2\pi}{\lambda} = k = 10^{-3} \text{ Å}^{-1}$$

$$k \sim 1 \text{ Å}^{-1}$$

nur bei $k=0$ (Γ -Punkt) $\omega \neq 0$
optischer Zweig

Neutronen : inelastisch : therm. Neutronen

$$E = kT$$

$$\lambda \sim 1 \text{ Å}$$

$$\omega_f = \omega' - \omega_0 \quad ; \text{ f: } \omega, \text{ Energie vor und nach dem Stoßprozess}$$

$$q = h' - h_0 \quad , \text{ Kristallimpuls}$$

Thermische Eigenschaften des Kristallgitters

22.05.05

spezifische Wärme

$$\langle S_{\text{tot}} \rangle_T = 0$$

$$\langle S_{\text{tot}}^2 \rangle_T : \frac{1}{2} N_a w_q^2 \langle S_{\text{tot}}^2 \rangle = \frac{1}{2} k_B T$$

$$\text{gesamte innere Energie} \quad U = 3k_B T \quad (3 \times \text{pot} + 3 \times \text{kin})$$

Energiedichte im Festkörper

$$u = \frac{U}{V} = \frac{N}{V} 3kT$$

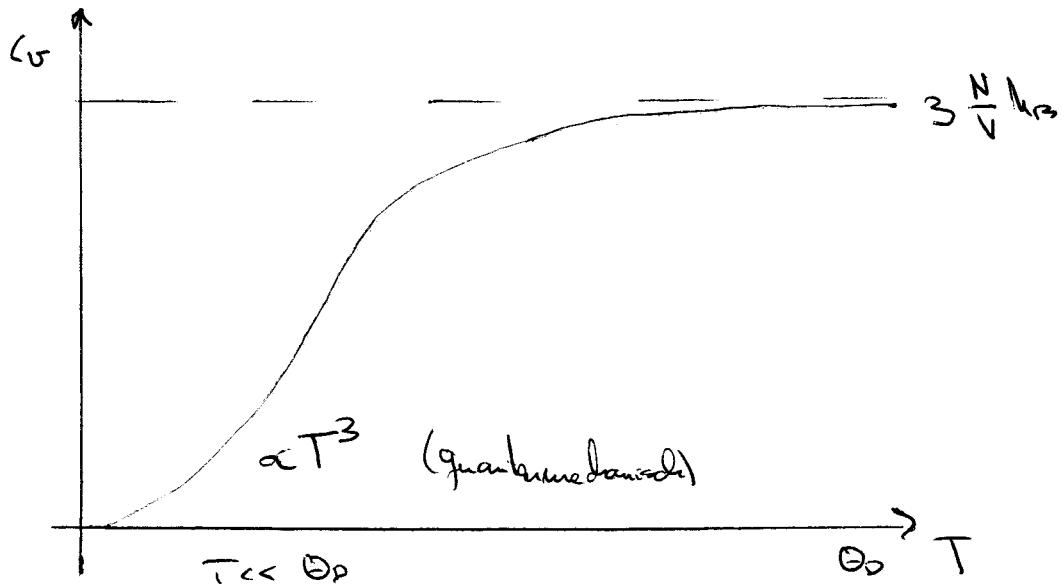
spezifische Wärme (konst. V)

$$c_v = \frac{\partial u}{\partial T} \Big|_V = \frac{3N}{V} k_B$$

$$\Delta Q = c_v \cdot \Delta T$$

(Dulong - Petit)

Experiment :



harmonischer Osz. (qm.)

$$E_n = \hbar \omega (n + \frac{1}{2}) \quad \hat{=} M \omega^2 \langle s^2 \rangle$$

Kristallimpuls \vec{q}

Bose - Verteilung

Boltzmann: Wahrscheinlichkeit, dass einzelnes Teilchen ein Niveau mit der Energie E_n einnimmt

$$P_n \propto e^{-E_n / k_B T}$$

Normierung $\sum P_n = 1$

$$P_n = \frac{e^{-\frac{\hbar\omega(n+\frac{1}{2})}{kT}}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{\hbar\omega(n+\frac{1}{2})}{kT}}} = \frac{e^{-\frac{\hbar\omega n}{kT}}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{\hbar\omega n}{kT}}}$$

$$\langle n \rangle_T = \frac{\sum_n n \cdot e^{-\frac{\hbar\omega n}{kT}}}{\sum_n e^{-\frac{\hbar\omega n}{kT}}}$$

$$\frac{\hbar\omega}{kT} \rightarrow x : \quad \langle n \rangle = \frac{\sum_n n \cdot e^{-nx}}{\sum_n e^{-nx}}$$

$$\frac{f'}{f} = \frac{d}{dx} \ln(f)$$

$$= - \frac{d}{dx} \ln \underbrace{\sum_n e^{-nx}}_{\text{geom. Reihe}}$$

$$\begin{aligned} &= - \frac{d}{dx} \ln \frac{1}{1-e^{-x}} \\ &= \frac{d}{dx} \ln (1-e^{-x}) \\ &= \frac{e^{-x}}{1-e^{-x}} \end{aligned}$$

$$\boxed{\langle n \rangle_T = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1}}$$

mittlere Teilchenzahl im thermischen Gleichgewicht für nicht-
interagierende Teilchen in Zuständen, die mit beliebig vielen Teilchen besetzt werden können

$$\text{Einschub : } \sum_{BZ} d^3 q = V_{BZ} \quad ; \quad \sum_{ws} d^3 r = V_{ws}$$

$$\text{Es gilt : } V_{BZ} \cdot V_{ws} = (2a)^3$$

Gesamtenergiedichte eines Kristalls (Phonon)

$$u(T) = \frac{1}{(2\pi)^3} \sum_S \int_{BZ} d^3 q \quad E(\omega(q), T)$$

└ Summe über die Zweige

$$= \frac{1}{(2\pi)^3} \sum_S \int_{BZ} d^3 q \quad \text{tr}_{ws} \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega(q)}{kT}} - 1} \right)$$

Näherung für $u(T)$ und c_v

1) bei hoher Temperatur: $\frac{\hbar\omega}{kT} \ll 1$

$$\begin{aligned} \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1} &= \frac{1}{1 + \frac{\hbar\omega}{kT} + \frac{1}{2} \frac{\hbar\omega}{kT}^2} \\ &= \frac{kT}{\hbar\omega} \left(1 - \frac{1}{2} \frac{\hbar\omega}{kT} \right) \\ &= \frac{kT}{\hbar\omega} - \frac{1}{2} + O(1) \end{aligned}$$

$$\rightarrow u(T) = \frac{1}{(2\pi)^3} 3 N_a V_{BZ} kT = \frac{3N_a}{V_{ws}} kT = \frac{3N_a}{V} k_B T$$

↑
3 Zweige
1 × lang.
2 × transv.

: allg. $S = 3 \times \text{akustisch}$
 $+ (3N_a - 3) \times \text{optisch}$
 $= 3N_a$

Bei hohen Temperaturen kommt man also wieder zur Regel von Dulong-Petit (vgl. graph vor 2 Seiten)

2) niedrige Temperaturen : nur niedrige Moden sind interessant

$\omega \propto c \cdot q$ linearer Zusammenhang beim akustischen Zweig ($c = \text{Schallgeschw.}$)

$$u(T) = \left(\frac{3}{2\pi^3} \int_{BZ} 4\pi q^2 dq \right) \hbar c q \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{e^{\hbar c q / kT} - 1} \right)$$

Isotropie
des Kristalls
→ Winkelanteil
aus integriert

$$\frac{\hbar c q}{kT} \Rightarrow x$$

$$\dots = \frac{4\pi \cdot 3}{(2\pi)^3} \left(\frac{k_B T}{\hbar c} \right)^4 \hbar c \underbrace{\int_0^{\frac{\hbar c q}{kT}} dx \frac{x^3}{e^x - 1}}_{\frac{4}{15}} + \text{const}$$

$$C_V = \frac{\pi^2}{10} k_B \left(\frac{k_B T}{\hbar c} \right)^3 \propto T^3$$

3) Debye-Näherung für beliebige Temperaturen

$$\omega(q) = c \cdot 1q1 \quad \text{isotrop und linear im ganzen Raum}$$

Näherung der Brillouin-Zone als Kugel

$$\oint V_{BZ} = \int_{BZ} d^3 q = 4\pi \int_0^{q_0} q^2 dq = \frac{(2\pi)^3}{V_{WS}}$$

$$u(T) = \frac{1}{(2\pi)^3} 3 N_A 4\pi \int_0^{q_0} dq q^2 \hbar c q \left(\frac{1}{e^{\hbar c q / kT} - 1} + \frac{1}{2} \right)$$

$$\frac{\hbar c q}{kT} \rightarrow x$$

$$\underline{\underline{g(T)}} = \frac{1}{(2\pi)^3} 3 N_a \frac{1}{h} =$$

$$C_v = \frac{1}{(2\pi)^3} 3 N_a k_B T \omega \int_0^{\infty} dq q^3 \left(\frac{tcq}{kT^2} e^{tcq/kT} \right) / \left(e^{tcq/kT} - 1 \right)^2$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^3} 3 N_a k_B T \omega q_0^3 \left(\frac{kT}{kQ_B} \right)^3 h \int_0^{Q_B/T} dx \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2} \quad \mid tcq_0 \rightarrow kQ_B$$

$$= \frac{q N_a}{(2\pi)^3} V_B \omega k_B \left(\frac{T}{Q_B} \right)^3 \cdot \int_0^{Q_B/T} dx \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2}$$

Anharmonische Effekte

- Längenausdehnung
- C_V bei hoher Temperatur
- endl. Wärmeleitfähigkeit

$$\text{Ausdehnungskoeff. : } \alpha = \frac{1}{l} \left(\frac{\partial l}{\partial T} \right)_p = \frac{1}{3V} \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_p$$

$$\rightarrow \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_p = \left(\frac{\partial V}{\partial P} \right)_T \cdot \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_V$$

$$\sim \frac{1}{\alpha} \text{ Kompressibilität}$$

innere Energie

$U =$ harmonischer Oszillator + Bose - Verteilung

$\omega(q)$ Dispersionsrelation

s Zweige

$U(\omega(q), s)$ Gesamtenergie

$$U: dU = -P dV + T dS$$

$$\rightarrow F = U - TS \quad \text{freie Energie}$$

$$dF = dU - T ds - S dT$$

$$= -P dV + S dT$$

$$\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_T = -P$$

$$\left(\frac{\partial u}{\partial T}\right)_V = T \cdot \left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_V$$

$\underline{u} \Rightarrow \text{Integration} \Rightarrow \underline{S}$

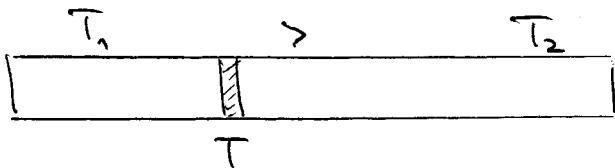
$\Rightarrow \underline{F} \Rightarrow \alpha$

$$\frac{\partial \omega}{\partial v} \neq 0 \Leftrightarrow \alpha \neq 0$$

Anharmonizität

$$\alpha = \frac{1}{3} \sum_{q,s} -\frac{v}{\omega_{qs}} \underbrace{\frac{\partial \omega_{qs}}{\partial v}}_{\alpha \neq 0} \underbrace{\frac{\hbar \omega_{qs}}{v}}_{\text{Energie}} \underbrace{\frac{\partial \langle u_T \rangle}{\partial T}}_{\text{Energie}}$$

Wärmeleitung



$$\text{Wärmestrom } J_q = \kappa w v_x (\langle u \rangle_T - \langle u \rangle_0)$$

$$\frac{d \langle u \rangle}{dt} = \left. \frac{\partial \langle u \rangle}{\partial t} \right|_{\text{Diff}} + \left. \frac{\partial \langle u \rangle}{\partial t} \right|_{\text{Vertall}}$$

$$\frac{d \langle u \rangle}{dt} = 0 \quad \text{stationär}$$

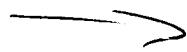
$$\left. \frac{\partial \langle u \rangle}{\partial t} \right|_{\text{Diff}} = - \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial t} = - \frac{\partial u}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial x} v_x$$

Relaxationsansatz:

$$\left. \frac{\partial \langle u \rangle}{\partial x} \right|_{\text{Zerfall}} = \frac{\langle u \rangle_T - \langle u \rangle_0}{\tau_{\text{relax}}}$$

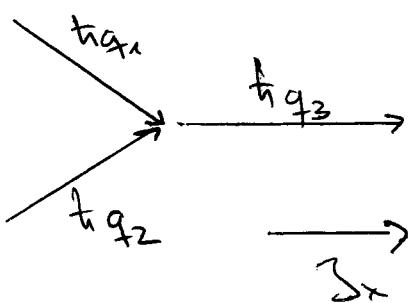
$$\begin{aligned} \rightarrow \delta_F &= - \tau \omega v_x \tau v_x \frac{\partial u}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial x} \\ &= \frac{1}{3} \langle v^2 \rangle c_v \tau \frac{\partial T}{\partial x} \\ &= - \tau \frac{\partial T}{\partial x} \end{aligned}$$

$\hat{2} \Rightarrow$ Wärmefüllfähigkeit



Bei tiefen Temperaturen

$$\langle \ell \rangle = \hbar \omega \cdot \tau \quad \text{mittlere freie Weglänge}$$



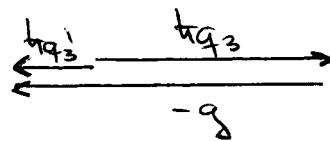
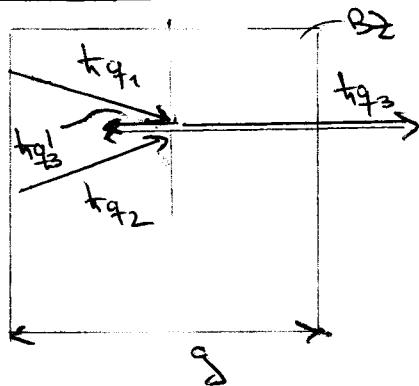
Netto-Strom ändert sich
nicht

$$\tau = \text{const} : \lambda \sim c_v \sim T^3 \quad ; \quad T \ll \Theta_D$$

$$\underline{T \gg \Theta_D} : n = \frac{1}{e^{\hbar \omega / kT} - 1} \approx -\frac{1}{\frac{\hbar \omega}{kT}} \\ = \frac{k}{\hbar \omega} T$$

$$n \sim T ; c_v = \text{const} ; \lambda \sim T$$

$$\underline{T = \Theta_D} :$$



$$\hbar q_1 + \hbar q_2 = \hbar q_3 - g$$

\Rightarrow Abnahme von λ

$$\text{Debye} : \omega_D = c q_D \quad ; \quad q_D \sim \text{Brillouin-Zonenrand}$$

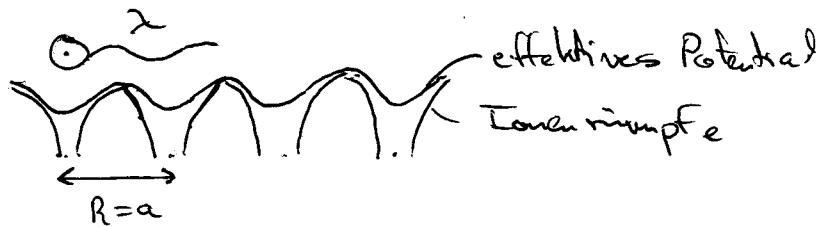
$$E \sim \hbar \omega_D = \hbar c q_D \quad ; \quad n = \frac{1}{e^{\hbar c q_D / kT} - 1}$$

$$n \sim e^{-\frac{E_{\text{gap}}}{kT}}$$

$$\tau \sim n \sim$$

Elektronen im Festkörper

$$\hat{H}(\vec{r}) = \hat{H}(\vec{r} + \vec{R}) \quad \text{gitterperiodisch}$$



$$\text{Ein-Elektronenpotential } U(\vec{r}) = U(\vec{r} + \vec{R})$$

$$\frac{d}{dx} \left(\frac{x}{U(x+a)} \right) = \frac{d}{dx} \left(\frac{x}{x+a} \right) - \frac{1}{(x+a)^2} = 1 \cdot \frac{1}{x+a} \quad (\text{l. dim.})$$

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(r) \quad \text{gitterperiodisch}$$

Bloch-Theorem

$$T_{\vec{R}} f(\vec{r}) = f(\vec{r} + \vec{R}) \quad \text{Translations-Operator}$$

$$\begin{aligned} T_{\vec{R}} H \psi &= H(\vec{r} + \vec{R}) \cdot \psi(\vec{r} + \vec{R}) = H(\vec{r}) \cdot \psi(\vec{r} + \vec{R}) \\ &= H \cdot T_{\vec{R}} \psi \end{aligned}$$

$$[H, T_{\vec{R}}] = 0$$

$$H \psi = E \psi$$

$$T_{\vec{R}} \psi = c(\vec{R}) \psi$$

$$T_{\vec{R}} T_{\vec{R}'} \psi = c(\vec{R}) \cdot c(\vec{R}') \cdot \psi$$

$$T_{\vec{R}} T_{\vec{R}'} = T_{\vec{R} + \vec{R}'}$$

$$c(R+R') = c(R) \cdot c(R')$$

$$R = u_1 \vec{a}_1 + u_2 \vec{a}_2 + u_3 \vec{a}_3$$

$$c(R) = c(\vec{a}_1)^{u_1} \cdot c(\vec{a}_2)^{u_2} \cdot c(\vec{a}_3)^{u_3}$$

$$|\psi|^2 = 1 \text{ monierbar}$$

$$\rightarrow |\psi|^2 = 1$$

$$c(a_i) = e^{i 2\pi x_i} ; x_i \in \mathbb{R} \quad (\text{trivial})$$

$$c(R) = e^{i 2\pi [x_1 u_1 + x_2 u_2 + x_3 u_3]} \\ = e^{i \vec{k} \cdot \vec{R}}$$

$$\vec{k} = x_1 \vec{b}_1 + x_2 \vec{b}_2 + x_3 \vec{b}_3 \quad \text{Vektor im reell. Raum}$$

$$\vec{R} = u_1 \vec{a}_1 + u_2 \vec{a}_2 + u_3 \vec{a}_3 \quad \text{Realraum}$$

$$\vec{b}_i \cdot \vec{a}_j = 2\pi S_{ij}$$

$$\boxed{\psi(\vec{r} + \vec{R}) = e^{i \vec{k} \cdot \vec{R}} \cdot \psi(\vec{r})} \quad \text{Block-Theorem}$$

↓ Phasenfaktor

- ψ muss nur in der E2 betrachtet werden für ein k
 - \vec{k} Wellenvektor, kennzeichnet das Translationsverhalten der Wellenfkt. ψ_k
 - $|\psi|^2$ ist gitterperiodisch, da die Phase wegfällt
 $\psi(\vec{r})$ ist nicht gitterperiodisch (vgl. Phasenfaktor)
 - $\psi_k(\vec{r})$: "Blochfunktion" \Rightarrow Hamilton
- $$E = E(\vec{k}) = E_k$$

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

$$\Rightarrow \psi_k = \psi_{k+g}$$

$$E_k = E_{k+g}$$

Reduktion auf EZ in
reel. Raum

\Rightarrow Brillouin-Zone

31.5.06

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

$$\psi_k(\vec{r} + \vec{R}) = e^{i\vec{k}\vec{R}} \cdot e^{i\vec{k}\vec{r}} u_k(\vec{r})$$

$$\rightarrow u_k(\vec{r}) = u_k(\vec{r} + \vec{R})$$

solang die Aufenthaltsw. periodisch ist, ist die Leitfähigkeit unendlich

$$\psi_k(\vec{r} + \vec{R}) = e^{i\vec{k}\vec{R}} \cdot \psi_k(\vec{r})$$

$$\begin{aligned} \psi_{k+g}(\vec{r} + \vec{R}) &= e^{i(\vec{k}+\vec{g}) \cdot \vec{R}} \cdot \psi_{k+g}(\vec{r}) \\ &= e^{i\vec{k}\vec{R}} \cdot \psi_{k+g}(\vec{r}) \end{aligned}$$

$$\psi_k(\vec{r}) = \psi_{k+g}(\vec{r})$$

$$E_k = E_{k+g} \quad \text{Dispersion ist periodisch in } \vec{q}$$

$\vec{q} \triangleq$ reell. Gitterzurkator

praktisch: beschränkte Lösung auf 1. Brillouin-Zone

$$\vec{q} \leftrightarrow \omega(\vec{q})$$

$$\omega(\vec{q}) = \omega(\vec{q} + \vec{g})$$

$$\vec{k} \leftrightarrow E(\vec{k})$$

$$E(\vec{k}) = E(\vec{k} + \vec{g})$$

$u(\vec{r})$ aus Dichtefunktionalrechnung

effektives Elektrospotential

Problem: instanziel u. Korrelation

Freies Elektronengas

$$V = \text{const} \doteq 0$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi = E\psi \quad ; \quad \psi(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}}$$

$$E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \quad m^*: \text{effektive Masse}$$

m^* (Tensor, versch. Massen für versch. Richtungen)

$n_e \sim 10^{23} \text{ cm}^{-3}$ Dichte der Elektronen

Auffüllen der Energieniveaus mit jeweils 2 Elektronen
(spin- \uparrow , spin- \downarrow)

\Rightarrow Auffüllen bis zu maximaler Energie

$$E_{\text{HF}} = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} \quad \text{Fermi-Energie}$$

Elektronendichte:

$$\frac{n}{V} = n = \frac{2}{(2\pi)^3} \sum_0^{k_F} dk \cdot 4\pi k^2 = \frac{k_F^3}{3\pi^2}$$

im freien Elektronengas:

$$n = \frac{k_F^3}{3\pi^2}$$

Fermienenergie

$$E_F = \frac{\frac{t^2 k_F^2}{2m}}{2} = \frac{t^2}{2m} (3\pi^2 n)^{\frac{2}{3}}$$

Beispiel: Aluminium (Al) $[Ne] 3s^2 3p$

sp-Metall, 3 Valenzelektronen pro Atom
fcc Kristall $a = 4,05 \text{ \AA}$

$$n = (3 \cdot 4) / a^3 = 1,8 \cdot 10^{23} \text{ cm}^{-3}$$

$$k_F = (3\pi^2 n)^{\frac{1}{3}} = \left(\frac{3\pi^2}{12}\right)^{\frac{1}{3}} \cdot \frac{1}{a} = 1,75 \text{ \AA}^{-1}$$

Fermiwellenlänge

$$E_F = \frac{\frac{t^2 k_F^2}{2m}}{2} = 11,7 \text{ eV} (\sim 10 \text{ eV})$$

Fermiennergie

$$v_F = \frac{tk}{m} = 2,03 \cdot 10^6 \frac{\text{m}}{\text{s}} \sim 1\% c$$

Fermigeschw. (nicht die Bewegungsgeschw.
der e^- bzw. die Geschw. d. Stroms)

$$\text{Energiedichte: } u = \frac{E}{V} = \frac{2}{(2\pi)^3} \int dk \frac{k^2}{4\pi} \frac{t^2 k_F^2}{2m}$$

$$= \frac{1}{\pi^2} \frac{k^2}{2m} \frac{k_F^5}{5}$$

mittlere Energie/Elektron:

$$V \cdot \frac{n}{N} = \frac{E}{N} = \frac{1}{\pi^2} \frac{k^2}{2m} \frac{k_F^5}{5} \cdot \frac{3\pi^2}{k_F^3} = \frac{3}{5} \cdot E_F$$

$$\boxed{\frac{E}{N} = \frac{3}{5} E_F}$$

Druck bei $T=0K$

$$\begin{aligned} P &= \left(\frac{-\partial E}{\partial V} \right)_N = -\frac{\partial}{\partial V} \left(N \cdot \frac{3}{5} \frac{k^2 k_F^2}{2m} \right) \\ &= -\frac{\partial}{\partial V} \left(N \cdot \frac{3}{5} \frac{k^2}{2m} (3\pi^2 n)^{\frac{2}{3}} \right) \\ &= -\frac{\partial}{\partial V} \left(N \cdot \frac{3}{5} \frac{k^2}{2m} (3\pi^2 \frac{N}{V})^{\frac{2}{3}} \right) \\ &= \frac{2}{3} \frac{E}{V} \end{aligned}$$

für Ad: $p = 1,34 \cdot 10^{11} \text{ Pa}$

$$\chi = -V \cdot \frac{\partial P}{\partial V} = \frac{5}{3} P = 2,24 \cdot 10^{11} \text{ Pa} \quad (\text{exp. } 0,75 \cdot 10^{11} \text{ Pa})$$

Zahl d. Zustände mit Energie $< E$

$$n(E) = \frac{k^3}{3\pi^2} = \frac{1}{3\pi^2} \cdot \left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)^{3/2}$$

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

Zustandsdichte

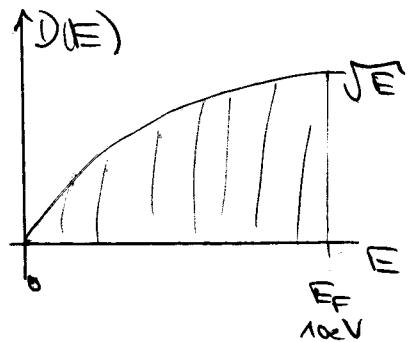
$D(E) = \frac{dn}{dE} \hat{=} \text{Zahl d. Zustände im Intervall } [E, E+dE]$

$$D(E) = \frac{1}{3\pi^2} \cdot \frac{3}{2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \cdot \sqrt{E}$$

$$= \frac{1}{3\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \cdot \sqrt{E}$$

$$D(E_F) = \frac{3}{2} \frac{n(E_F)}{E_F}$$

$$A_Q = \frac{0,38}{eV} \cdot \frac{1}{V_{ez}}$$



Fermiverteilung

bei $T \neq 0$ undl. Temp

F freie Energie

$$\delta F = \sum_i \frac{\partial F}{\partial u_i} \delta u_i = 0$$

Teildenzahlerhaltung: $\sum_i \delta u_i = 0$

Teildistanzstand zwischen zwei Niveaus

$$\frac{\partial F}{\partial u_1} \delta u_1 + \frac{\partial F}{\partial u_2} \delta u_2 = 0$$

$$\delta u_1 = - \delta u_2$$

$$\frac{\partial F}{\partial u_i} = \text{const} \quad \forall i$$

$$\boxed{\mu := \frac{\partial F}{\partial u}} \quad \text{chemisches Potential}$$

$$\mu(T) = \text{const}$$

$$F = U - TS$$

$$U = \sum_i n_i E_i \quad n_i = \text{Teilchen im Niveau mit Energie } E_i$$

$$S = k_B \ln(P)$$

P = Zahl der Möglichkeiten, die Teilchen auf die Niveaus i zu verteilen

g_i sei der Entartungsgrad des Niveaus i

1. Teilchen

$$g_i$$

2. Teilchen

$$g_i(g_i-1)$$

n -te Teilchen

$$g_i(g_i-1) \dots (g_i-n+1) \\ = \frac{g_i!}{(g_i-n)!}$$

allerdings: Teilchen sind unterscheidbar

→ $n_i!$ Permutationen

$$\rightarrow P_i = \frac{g_i!}{n_i!(g_i - n_i)!}$$

$$P = \prod_i \frac{g_i!}{n_i!(g_i - n_i)!}$$

$$S = k_B \cdot \ln(P)$$

$$= k_B \sum_i [\ln(g_i!) - \ln(n_i!) - \ln((g_i - n_i)!)]$$

Stirlingsche Näherung: $\ln(n!) \approx n \cdot \ln(n) - n$
für große n

$$\mu = \frac{\partial F}{\partial n_i} = \frac{\partial}{\partial n_i} [u - TS]$$

$$= \frac{\partial}{\partial n_i} [\sum_i n_i E_i - kT \sum_i [\ln \dots]]$$

$$\mu = \frac{\partial F}{\partial n_i} = E_i - k_B T \left[(\ln(n_i) - 1) - \ln(g_i - n_i) + 1 \right]$$
$$= E_i - k_B T \cdot \ln\left(\frac{n_i}{g_i - n_i}\right)$$

$$\rightarrow \frac{n_i}{g_i - n_i} = \exp\left[-\frac{E_i - \mu}{k_B T}\right]$$

{Vorzeichen}

$$\rightarrow n_i = \frac{g_i}{e^{(E_i - \mu)/k_B T} + 1} = n_i(E_i, T)$$

Fermi-Verteilung

$$f(E, T) = \frac{1}{e^{(E - \mu)/k_B T} + 1}$$



26.06 Spez. Wärmekapazität d. Elektronen

$$U(T) = \int_0^{\infty} dE D(E) \cdot E \cdot f(E, T) - \int_0^{\infty} dE D(E) E f(E_0)$$

$$c_v = \frac{\partial U}{\partial T} = \int_0^{\infty} dE E \cdot D(E) \cdot \frac{\partial f(E, T)}{\partial T}$$

$$= D(E_F) \int_0^{\infty} dE E \frac{\partial f(E, T)}{\partial T}$$

$$n = \int_0^{\infty} dE f(E, T) D(E) = \text{const}$$

$$\frac{\partial n}{\partial T} = \int_0^{\infty} dE D(E) \frac{\partial f}{\partial T} = 0$$

$$c_v = D(E_F) \int_0^{\infty} dE (E - E_F) \cdot \frac{\partial f(E, T)}{\partial E}$$

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

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

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

Linearer Anstieg mit der Temperatur

Weitere anschauliche Motivierung:

Zahl, der Elektronen, die man anregen kann:

$$n = D(E_F) \cdot k_B T$$

$$\langle n \rangle = k_B T \cdot n = D(E_F) k_B^2 \cdot T^2$$

$$c_v \approx 2 D(E_F) k_B^2 T$$

bei freiem Elektronengas

$$D(E_F) = \frac{3}{2} \frac{n}{E_F} ; \sigma \sim n \cdot \frac{k_B T}{E_F}$$

geringer Beitrag, nur wichtig bei tiefen Temperaturen

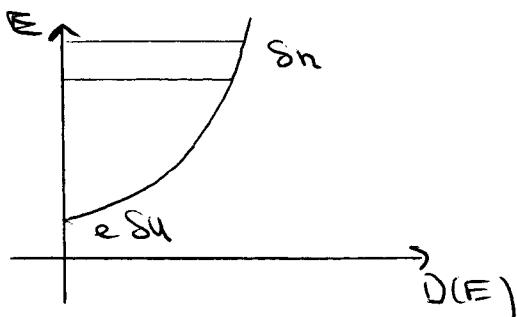
Elektrostatische Abschirmung

- a) Thomas - Fermi - Abschirmung
geladener Defekt im homog. Elektronengas

Frage: Wie sieht die räumliche Verteilung der gestörten Elektronendichte aus?

$s_{\text{U}}(r)$ $r \hat{=} \text{radiale Koordinate (Radialsymmetrisch)}$
 \uparrow
Änderung des Potentials

$$e \cdot s_{\text{U}} \cdot D(E_F) = s_n \quad \text{Anzahl der angetriebenen Elektronen}$$



Poisson-Gleichung muss gelöst werden

$$\nabla^2 s_{\text{U}} = -\frac{e}{\epsilon} = -\frac{e s_{\text{U}} D(E_F)}{\epsilon}$$

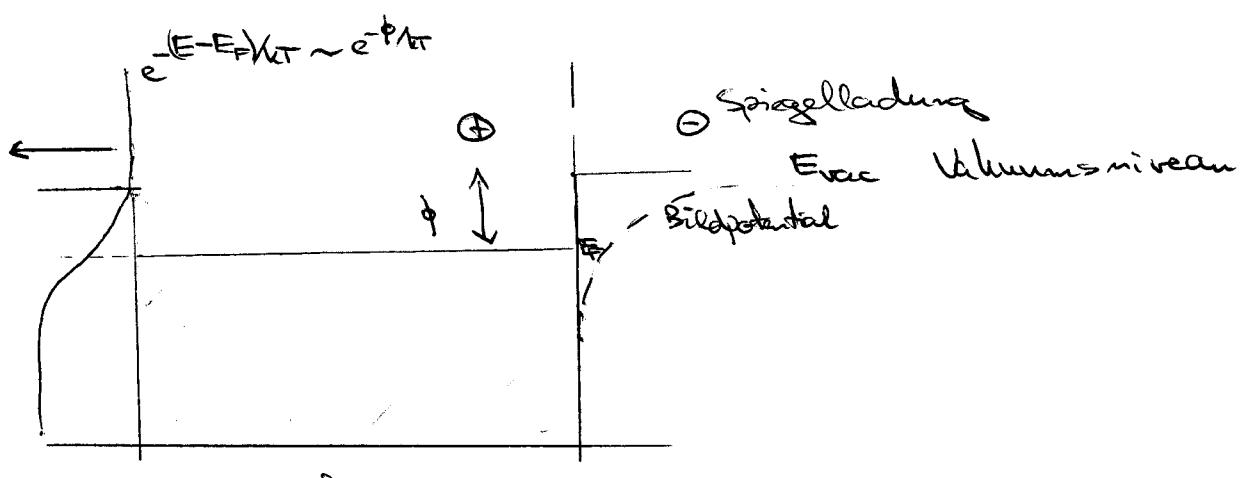
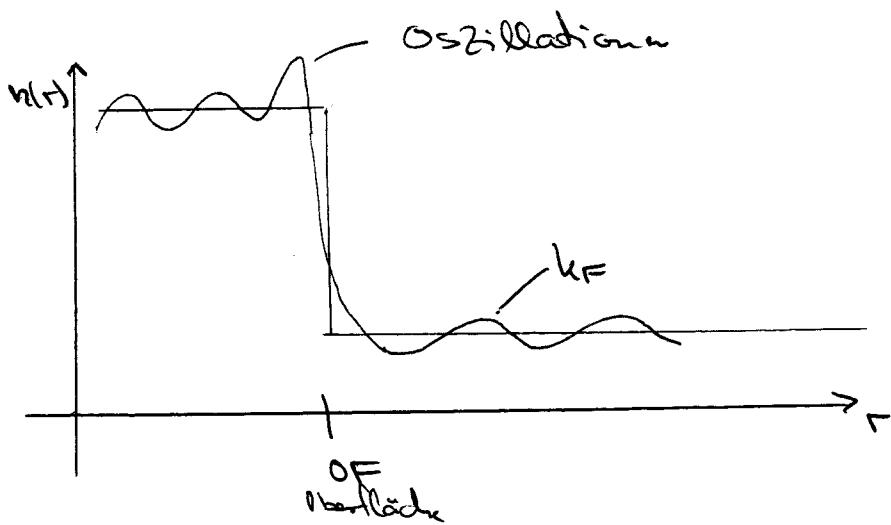
$$\nabla^2 \rightarrow \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 - \frac{\partial^2}{\partial r^2} \quad \text{Lösung: } s_{\text{U}} \propto \frac{e^{-r/r_F}}{r}$$

$$r_F = \sqrt{\frac{\epsilon_0}{e^2 D(E_F)}}$$

$$\text{freies } e\text{-Gas: } D(E_F) = \frac{3}{2} \frac{n}{E_F} \rightarrow r_F \sim \sqrt{\frac{1}{n}}$$

$$Cu: n = 8,5 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3}; r_{TF} = 0,55 \text{ Å}$$

r_{TF} ist der Radius, nach dem die pos. Störstelle durch das e^- -Gas abgeschirmt ist



ϕ : Austrittsarbeit

thermische Emission (Glowfaden)

$$j = \frac{e}{V} \sum_k v_k(k) = \frac{e}{V} \frac{2}{(2\pi)^3} \int d^3 k \frac{\epsilon(k)}{m}$$

$$\frac{\epsilon^2 k^2}{2m} > E_F + \phi$$

$$v_k > 0$$

$$= \frac{4\pi me}{h^3} (k_B T)^2 e^{-\phi/k_B T} \quad \text{Richardson - Dushman}$$

Naheran freie Elektronenenges

$$V(\vec{r}) = V(\vec{r} + \vec{R}) \\ = \sum_g v_g e^{-i\vec{g}\vec{r}} \quad \text{Fourierreihe}$$

$e^{i\vec{g}\vec{R}} = 1 \rightarrow \vec{g}$ sind rec. Gittervektoren

$$u_k(\vec{r}) = \sum_g u_g e^{i\vec{g}\vec{r}} \quad , \quad \gamma = e^{i\vec{k}\vec{r}} u_k(\vec{r})$$

$$\text{Fourierkoeff.: } u_g = \frac{1}{V_{\text{Z}}} \sum_{\vec{r}} V(\vec{r}) e^{-i\vec{g}\vec{r}} d^3 r$$

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 \gamma + V \gamma = E \gamma \quad \begin{aligned} & \text{Hamilton für eigen} \\ & \text{Elektron in effektive} \\ & \text{Potential } V \end{aligned}$$

$$\gamma = e^{i\vec{k}\vec{r}} \sum_g u_g e^{i\vec{g}\vec{r}} ; \quad V = \sum_g v_g e^{i\vec{g}\vec{r}}$$

$$\sum_g \left(-\frac{\hbar^2}{2m} (\vec{k} + \vec{g})^2 - E \right) u_g e^{i\vec{g}\vec{r}} + \sum_{gg'} v_g u_g e^{i\vec{g}\vec{r}} e^{i\vec{g}'\vec{r}} = 0$$

$$u_g \rightarrow u_{g-g'} \quad e^{i\vec{g}\vec{r}} \rightarrow e^{i(\vec{g}-\vec{g}')\vec{r}} =$$

$$\sum_g \left[\left(-\frac{\hbar^2}{2m} (\vec{k} + \vec{g})^2 - E \right) u_g + \sum_{g'} v_g u_{g-g'} \right] e^{i\vec{g}\vec{r}} = 0$$

$= 0 \quad \text{für alle } \vec{r}$

$$\Rightarrow \left(\frac{\hbar^2}{2m} (\vec{k} + \vec{g})^2 - E \right) u_g + \sum_{g'} k_g u_{g-g'} = 0$$

- lineare GGS für $u_g(\vec{k})$, unabhängig von \vec{r}
- $E = E(\vec{k})$
- nur Lösungen für bestimmte $E(\vec{k})$

Lösung:

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} (\vec{k} + \vec{g})^2 \quad \text{für ein } \vec{g}, \text{ dann } \vec{g} \text{ wie gegeben}$$

wenn

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} (\vec{k} + \vec{g}_1)^2 = \frac{\hbar^2}{2m} (\vec{k} + \vec{g}_2)^2 \quad \text{für zwei (oder mehr) } g\text{-Vektoren } \vec{g}_1, \vec{g}_2$$

$$\vec{g} - \vec{g}' = \vec{g}'' ; \vec{g}' = \vec{g} - \vec{g}'''$$

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m} (\vec{k} + \vec{g})^2 - E \right] u_g + \sum_{g''} V_{g-g''} u_{g''} = 0$$

$$\boxed{\left[\frac{\hbar^2}{2m} (\vec{k} + \vec{g}_1)^2 - E + V_0 \right] u_{g1} + V_{g1-g2} u_{g2} = 0}$$

$$\boxed{\left[\frac{\hbar^2}{2m} (\vec{k} + \vec{g}_2)^2 - E + V_0 \right] u_{g2} + V_{g2-g1} u_{g1} = 0}$$

$$\begin{pmatrix} \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} u_{g1} \\ u_{g2} \end{pmatrix} = 0 \quad \det \begin{pmatrix} \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot \end{pmatrix} \stackrel{!}{=} 0$$

→ quadr. Gl. für $E(\vec{k})$

$$E_{1/2} = V_0 + \frac{1}{2} \frac{\hbar^2}{2m} \left[(\vec{k} + \vec{g}_1)^2 + (\vec{k} + \vec{g}_2)^2 \right]$$

$$\pm \sqrt{\left\{ \frac{1}{2} \frac{\hbar^2}{2m} \left[(\vec{k} + \vec{g}_1)^2 - (\vec{k} + \vec{g}_2)^2 \right] \right\}^2 + |V_{g1-g2}|^2}$$

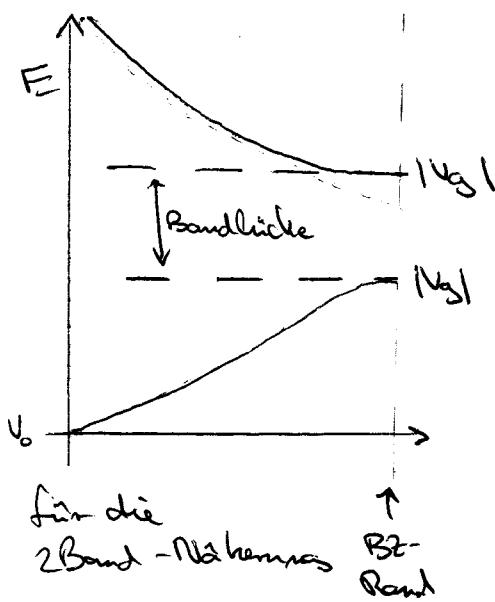
$$V_{g1-g2} = V_{g2-g1}^*$$

$$(\vec{k} + \vec{g}_1)^2 = (\vec{k} + \vec{g}_2)^2 ,$$

$$E_{r2} = V_0 + \frac{\hbar^2}{2m} (\vec{k} + \vec{g}_{1/2})^2 \pm |V_{g1-g2}|$$

Wellenfunktion bei $q/2$ (am BZ-Rand)

12.6.05



$$\psi(r) = e^{ikr} \cdot \sum_g u_g e^{ig\vec{q} \cdot \vec{r}}$$

E an BZ-Rand in free-electron approximation eingesetzt liefert:

$$\pm |k_{g1-g2}| u_{g2} + k_{g1-g2} \cdot u_{g2} = 0$$

$$u_{g2} = \pm \frac{v_{g1-g2}}{|k_{g1-g2}|} u_{g2}$$

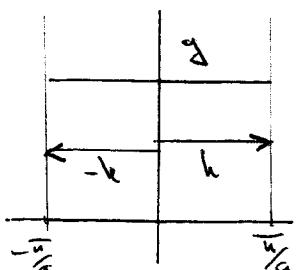
$$u_{g1} = \mp e^{i\varphi} u_{g2} \quad \text{Unterschied nur in der Phase}$$

$$\begin{aligned} \psi(r) &= e^{ikr} u_{g1} (e^{ig_1 \vec{q} \cdot \vec{r}} + e^{i\varphi} e^{ig_2 \vec{q} \cdot \vec{r}}) \\ &= e^{ikr} u_{g1} e^{-i\varphi/2} (e^{+i\varphi/2} e^{ig_1 \vec{q} \cdot \vec{r}} + e^{-i\varphi/2} e^{ig_2 \vec{q} \cdot \vec{r}}) \\ &= u_{g1} e^{-i\varphi/2} (e^{i(k+g_1)r + i\varphi/2} + e^{i(k+g_2)r - i\varphi/2} \end{aligned}$$

$$\text{Brillouin zone boundary: } \vec{k} + \vec{q} = -(\vec{k} + \vec{q}_2)$$

$$= 2u_{g1} e^{-i\varphi/2} \left\{ \begin{array}{l} \cos((k+g_1)r + \frac{\varphi}{2}) \\ \sin((k+g_1)r + \frac{\varphi}{2}) \end{array} \right.$$

\Rightarrow stehende Wellen am BZ-Rand



$$\text{Unterschiedliche Aufenthaltswahrscheinlichkeit} \\ (2\pi R \propto \begin{cases} \cos^2(k+g_1)r + \\ \sin^2(k+g_2)r \end{cases}; \text{V. reell}, \varphi=0)$$

führt zur Aufspaltung d. Bänder am BZ-Rand

Tight Binding Bandstruktur

anderer Ansatz: nicht fast-frei, sondern fast gebundene e^-

lokale, atomare Wlfkt. $\psi(\vec{r}) \xrightarrow{\text{large } \vec{R}} 0$

$$\text{Ansatz: } \psi_k(\vec{r}) = \sum_i b_i \sum_{\vec{R}} e^{i \vec{k} \vec{R}} \psi_i(\vec{r} - \vec{R})$$

$i \in s, p, d$ - Wellenfkt

Zz.: $\psi_k(\vec{r})$ ist Blochwelle

$$\vec{R} = \vec{R}' + \vec{R}''$$

$$\begin{aligned} \psi_k(\vec{r} + \vec{R}'') &= \sum_i b_i \sum_{\vec{R}} e^{i \vec{k} \vec{R}} \psi_i(\vec{r} - \vec{R} + \vec{R}'') \\ &= \sum_i b_i \sum_{\vec{R}'} e^{i \vec{k} \vec{R}'} \psi_i(\vec{r} - \vec{R}') \\ &= e^{i \vec{k} \vec{R}''} \cdot \psi_k(\vec{r}) \quad \square \end{aligned}$$

Einsetzen in SG

$$\sum_i b_i \sum_{\vec{R}} e^{i \vec{k} \vec{R}} \left(\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) - E \right) \psi_i(\vec{r} - \vec{R}) = 0$$

$$\int \psi^*(\vec{r} - \vec{R}) \cdot 1 \cdots 1 \downarrow : \quad$$

$$\sum_i \left[\sum_{\vec{R}} e^{i \vec{k} \vec{R}} \delta_{\vec{R}, \vec{R}'} \psi_i^*(\vec{r} - \vec{R}') \left(\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) - E \right) \psi_i(\vec{r} - \vec{R}'') \right] b_i = 0$$

für $R' = R \hat{=} \text{atomare Probleme} \rightarrow \text{Normierung, Energie-richtung}$
 $R' \neq R \hat{=} \text{WV zwischen Nachbarn}$

$$\text{weg } \sum_{\vec{R}} \Rightarrow R' = 0 \quad (\text{o. B. d. A.})$$

man kommt bei der Summe auf jeden Fall einmal an die Stelle R'

Näherung: lineare Kette a

WW mit nächsten Nachbarn

S-Werte $q(r) = q(i_1)$, nur ein j-Wert

$$\sum_{R=0,\pm a} e^{ikR} \left[S d^3 r \varphi_i^*(r) \left(\frac{p^2}{2m} \nabla^2 + V(r) \right) \varphi_i(r-R) + E \underbrace{\int d^3 r}_{S(R)} \varphi_i^*(r) \varphi_i(r-R) \right] = 0$$

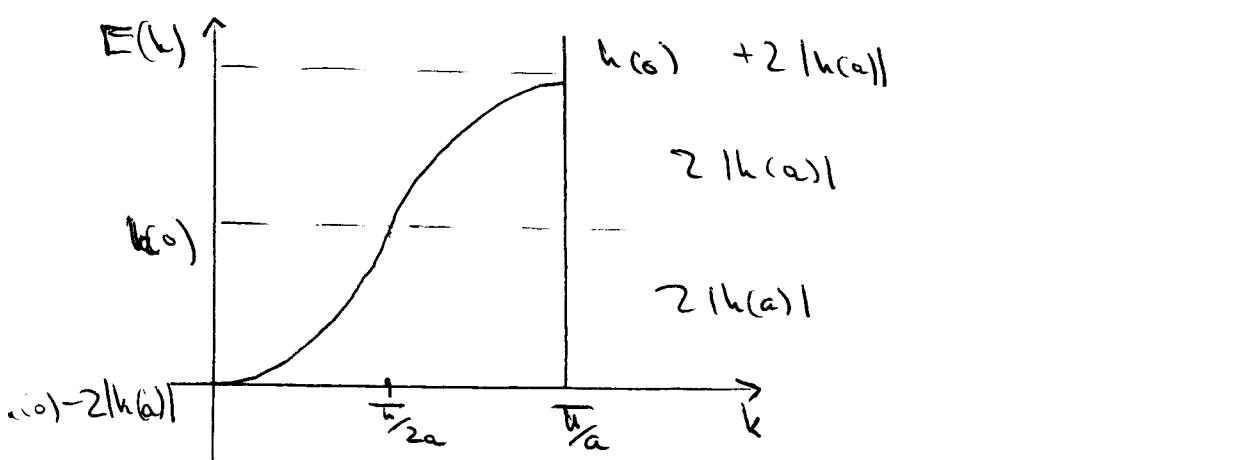
$$\rightarrow E(k) = \frac{\sum e^{ikR} h(R)}{\sum e^{ikR} s(R)}$$

$$V(r) = V(-r) \quad \text{inversionsymmetrisch}$$

$$h(a) = h(-a) \quad ; \quad s(a) = s(-a)$$

$$E(k) = \frac{h(0) + h(a) (e^{ika} + e^{-ika})}{s(0) + s(a) (e^{ika} + e^{-ika})}$$

$$= \frac{h(0) + 2h(a) \cos ka}{s(0) + 2s(a) \cos ka} \equiv h(0) + 2h(a) \cos ka$$



$$U(a) = \int d^3r \varphi^*(r) \left(\frac{t^2}{2m} \nabla^2 + V(r) \right) \varphi(r+a)$$

Wenn $\varphi(r)$ und $\varphi(r + a)$ großen Überlap haben

$\Rightarrow h(a)$ groß bei gegebener V

\Rightarrow große Radie 4 h(a)

Blockwelle

$$\psi_{in}(r) = e^{ikr} \cdot u_n(r)$$

Phase $\tilde{u}_n(r)$

$$k=0 \quad e^{ikr} = 1$$

$$k = \frac{\pi}{a}, -\frac{\pi}{a}$$

$$e^{ikr} = e^{\pm i \frac{\pi}{a} \cdot n \cdot a} \quad ; \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

$$= 1, -1, 1, -1, \dots$$

P_z  $k=0$ antibonding

 $k = \frac{\pi}{a}$ bonding

P_x  $k=0$ bonding

 $k = \frac{\pi}{a}$ antibonding

Transporteigenschaften

14.6.06

Semiklassische Elektronenbewegung

Elektronen sind Teilchen, die sich mit der Gruppengeschw.

$$\vec{v} = \frac{1}{\hbar} \nabla_k E(k)$$

$$\vec{v} = \vec{F}$$

elektrische Feldstärke: \vec{E} Elementarladung ≈ 0

Energieaufnahme $\Delta E = -e \vec{E} \cdot \vec{v} \cdot \Delta t$

$$\Delta E(k) = \hbar v(k) E \nabla_k E(k) \cdot \vec{\omega} = \hbar \vec{v} \cdot \vec{\omega}$$

$$\hbar \frac{\Delta k}{\Delta t} = -eE$$

$$[\hbar \vec{k} = -e \vec{E}]$$

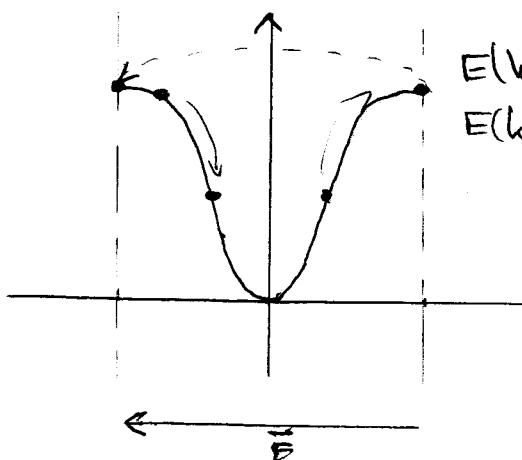
nicht trivial, als $F = p$
zu verstehen!

i.A. $\hbar \vec{k} \neq m \cdot \vec{v}$

beschreibt Erstickung
von $\hbar \vec{k}$ unter äußerem
Feld

Kristallimpuls \neq klassischen Impuls
 k ist ein Index $\Rightarrow \hbar$ Blochwelle

Blochoszillationen

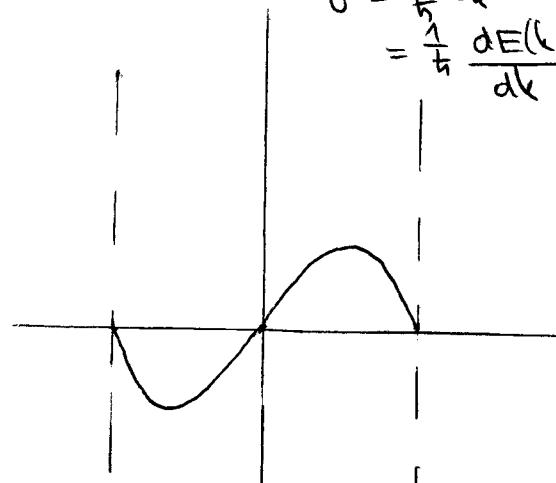


$$E(k) = E(k+q)$$

$$E(k) = E(-k)$$

$$\omega = \frac{1}{\hbar} \nabla_k E(k)$$

$$= \frac{1}{\hbar} \frac{dE(k)}{dk}$$



\Rightarrow Elektron oszilliert
(Blochsz.)

bei $\vec{E} = \text{const.}$!

Die Blochoscillation wird aber nicht beobachtet

$$\frac{2\pi}{a} = \vec{k} = \vec{k} - \left| -\frac{e\vec{E}}{\hbar} \right| \cdot \vec{T} \quad ; \quad T = \frac{2\pi\hbar}{eEa}$$

$$\vec{E} = 10 \frac{2V}{m} = \frac{1V}{cm}$$

$$a = 4 \text{ Å} \quad \hbar = 660 \text{ meV}$$

$$T = 10^{-7} \text{ sec} \hat{=} 10 \text{ kHz}$$

$$v_F = 10^6 \frac{\text{km}}{\text{s}}$$

$$l = 10 \text{ cm}$$

Freie Wellenlänge von $l = 10 \text{ cm}$ wird aber nicht erreicht (100 % realistisch)

Bei Halbleitern allerdings ist dies möglich

Elektrische Leitfähigkeit: Elektronen und Löcher

$$\begin{aligned} \text{Ström维奇} \vec{j} &= -en\vec{v} \\ &= -\frac{2e}{(2\pi)^3} \sum_{BZ, occ.} d^3k \cdot \vec{v}(k) \end{aligned} \quad \begin{array}{l} \text{für besetzte (oc.)} \\ \text{Zustände = Elektronen} \end{array}$$

im Grundzustand: $T=0, T \neq 0$

$$v(k) = v(-k); \quad f(k) = f(-k) \\ E(k) = E(-k)$$

→ kein Strom, sondern nur stat. Rauschen

$$\vec{j} = -\frac{2e}{(2\pi)^3} \left[\sum_{BZ, k=0} d^3k \vec{v}(k) - \sum_{BZ, unocc.} d^3k \vec{v}(k) \right]$$

$$= -\frac{2e}{(2\pi)^3} \left(- \sum_{BZ, unocc.} d^3k \vec{v}(k) \right) \quad \begin{array}{l} \text{für unbesetzte} \\ \text{Zustände = Löcher} \end{array}$$

Betrachtung von Elektronen und Löchern ist äquivalent, man muss nur ein Minuszeichen mitführen

Effektive Masse (Erleitfähigkeit b))

$$v_s = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E(k)}{\partial k_i}$$

$$v_s = \frac{1}{\hbar} \sum_i \frac{\partial E(k)}{\partial k_i \partial k_j} \cdot i_j$$

$$= \frac{1}{\hbar^2} \sum_i \frac{\partial E(k)}{\partial k_i \partial k_j} (-e E_i)$$

$$\frac{1}{m_{ij}^{**}} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E(k)}{\partial k_i \partial k_j}$$

Krümmung des Bandes

m_{ij}^{**} effektiver Massentensor

m^{**} effektive Masse

$$v_s = \sum_i \frac{1}{m_{ij}^{**}} (-e E_i)$$

Die "Masse" drückt aus, wie leicht sich das Elektron in Fk bewegt

Endlich neg. Masse ist möglich, das kann lassen sich in diesem Fall aber auch in die Ladung verschieben (\rightarrow Löcher)

$$m^{**} = \begin{pmatrix} m_{xx} & & \\ & m_{yy} & \\ & & m_{zz} \end{pmatrix}$$

$$E = \frac{\hbar^2}{2} \left[\frac{(k_x - k_{x0})^2}{m_{xx}} + \dots + \frac{(k_z - k_{z0})^2}{m_{zz}} \right]$$

$$v_i = \sum_j \frac{1}{m_j} (-eE)$$

$$m_j^* < 0 \quad \text{Valenzbandmaximum}$$

Beschränkung der Leitfähigkeit durch Stoßprozesse (c)

- Atomröhre (alte Vorstellung) tragen nicht bei (Blochwellen)
- e-e - Streuung trägt nicht bei (Pauliprinzip)

→

- ~~Defektstreuung~~ Störung des period. Potentiale
- Phonone

$$n(T) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^{q_0} 4\pi q^2 dq \frac{\frac{1}{e^{\frac{h\omega}{kT}} - 1}}{R \text{ichte der Phonone}}$$

Richte der Phonone
in Abh von T

$$= \frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^{q_0} 4\pi q^2 \frac{kT}{h\omega c} dq$$

$$= \frac{1}{2\pi^2} \frac{kT}{h\omega c q_0} \frac{q_0^3}{2}$$

$$= \frac{3}{2} n \cdot \frac{1}{\Theta_0}$$

Zahl der Atome

$$\Rightarrow \rho \sim T$$

linearer Anstieg des Widerstands mit
der Temperatur

Boltzmann-Gleichung und Leitfähigkeit

14G. GC

$$j = -\frac{2e}{(2\pi\beta)^3} \sum_{kz} \partial_k v(k) f(E_k, T)$$

f : Verteilungsfkt. mit äußerem elektr. Feld
(nicht Gleichgewicht!)

Verteilung im Gleichgewicht: $f(\vec{k}, T) = f_0 = \left(e^{\frac{(E-\mu)N_B T}{k}} + 1 \right)^{-1}$

Abweichung vom Gleichgewicht

$$- \frac{f(\vec{k}, T) - f_0(\vec{k}, T)}{\tau(k)} = \left. \frac{\partial f(\vec{k}, T)}{\partial t} \right|_{\text{Stöße}}$$

Relaxationsansatz

$\tau(k)$: mittlere Stoßzeit . empirischer Parameter ,
hier unabhängig von d. Abweichung vom Ggw.
 $f(\vec{k}, T) = f_0(\vec{k}, T)$

Zeitliche Entwicklung von $f(\vec{k}, T)$:

$$\begin{aligned} \frac{df(\vec{k}, t)}{dt} &= \nabla_k f(\vec{k}, t) \cdot \vec{k} + \frac{\partial f}{\partial t} \\ &= \left. \frac{\partial f(\vec{k}, T)}{\partial t} \right|_{\text{Stöße}} \end{aligned}$$

stationärer Zustand: man legt eine feste Spannung an, und hält diese . $\frac{\partial f}{\partial t} = 0$

$$\rightarrow \nabla_k f(\vec{k}, t) \vec{k} = - \frac{f(\vec{k}, T) - f_0(\vec{k}, T)}{\tau(\vec{k})}$$

(unter der Annahme das $T = \text{const}$ über den Letzter

$$\vec{k} = \frac{-eE}{\hbar} \quad \text{aus der semiklassischen Bwgl.}$$

$$f(\vec{k}, T) = f_0(\vec{k}, T) - \tau(\vec{k}) \frac{eE}{t} \nabla f(\vec{k}, T)$$

Boltzmann
- Transportgleichung

sehr allgemein gilt: \vec{k} wird erst spät eingesetzt und kann auch andere Abhängigkeiten haben

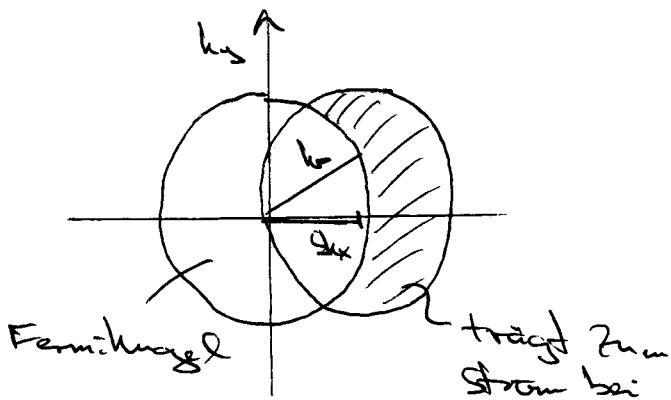
$$j = \frac{-2e}{(2\pi)^3} \int dk f(\vec{k}, T)$$

$$f = f_0 \Rightarrow j = 0 ; \quad f(E(k), T) = f(E(-k), T) \\ v(k) = -v(-k)$$

\Rightarrow Erst die Abweichung vom glg. führt zu Strom.

Interpretation der BTG als Transformationsmatrix

$$f(\vec{k}, T) \approx f_0(\vec{k} + \underbrace{\tau(\vec{k}) \frac{eE}{t}}_{Sk})$$



Wie groß ist die Störung?

Energiegewinn zwischen zwei Stößen

$$\Delta E = e \cdot E \cdot v_F \cdot t = 10^2 \frac{eV}{nm} \cdot 10^6 \frac{m}{s} \cdot 10^{-14}s = 10^{-6} \text{ eV} \\ \ll k_B T (25 \text{ meV})$$

\Rightarrow Änderungen zwischen zwei Stößen sehr klein

\Rightarrow Linearisierung d. Boltzmann-Gleichung, d.h.

$$f(\vec{k}, T) = f_0(\vec{k}, T) + \frac{eE}{t} \tau(\vec{k}) - \nabla_k f_0(\vec{k}, T)$$

(linearisierte Boltzmann-Gleichung)

einsetzen in die Stromdichte

$$\vec{j} = -\frac{2e}{(2\pi)^3} \int_{B^2} d^3k \vec{\tau}(\vec{k}) \left[f_0(\vec{k}, \vec{\tau}) + \frac{eE}{\hbar} \tau(\vec{k}) \cdot \nabla_k f_0(kT) \right]$$

$\underbrace{\phantom{f_0(\vec{k}, \vec{\tau}) + \frac{eE}{\hbar} \tau(\vec{k}) \cdot \nabla_k f_0(kT)}}$
 $= 0$

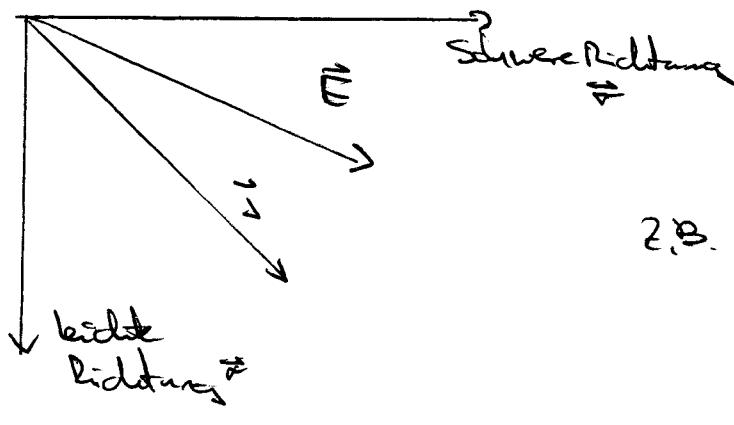
$$\nabla_k f_0(kT) = \frac{\partial f_0}{\partial E} \cdot \nabla_k E(k)$$

$$= -\frac{2e}{(2\pi)^3} \frac{E}{\hbar} \int_{B^2} d^3k \vec{\tau}(\vec{k}) \tau(\vec{k}) + \vec{\varepsilon}(\vec{k}) \cdot \frac{\partial f_0}{\partial E}$$

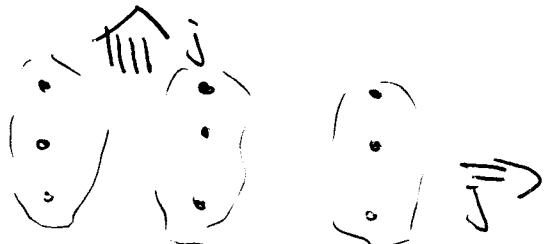
$$\vec{\sigma} = -\frac{2e^2}{(2\pi)^3} \int_{B^2} d^3k v(k) \vec{\varepsilon}(k) \cdot \nabla_k f_0(k, T)$$

Leitfähigkeitstensor

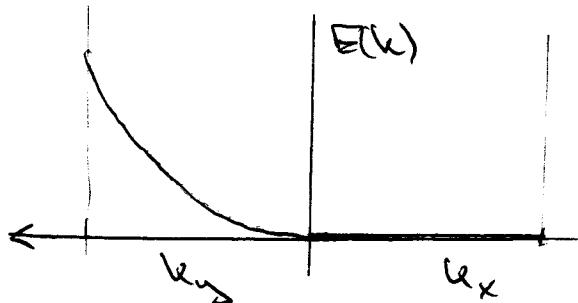
$$\Rightarrow \vec{j} = \vec{\sigma} \cdot \vec{E}$$



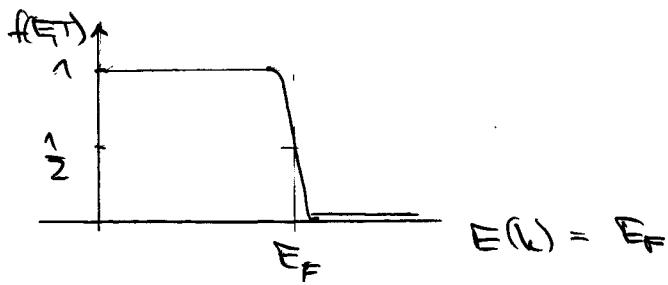
z.B.



E und \vec{j} müssen nicht parallel sein!



$$\tilde{\sigma} = -\frac{2e^2}{(2\pi)^3} \int d^3k v(k) \tau(k) \cdot \frac{\partial t}{\partial E}$$



$$\tilde{\sigma} = -\frac{2e^2}{(2\pi)^3} \int_{\text{Fermi Fläche}} d^3k v(k) \cdot \tau(k) \cdot \tilde{v}(k)$$

aber die Elektronen am Fermiwellen tragen zur Stromdichte bei!

$$\Delta E \sim 10^{-5} \text{ eV} \quad E_F \sim 10 \text{ eV} \quad b_B T = 25 \text{ meV}$$

falls $\tau = \text{const.}$:

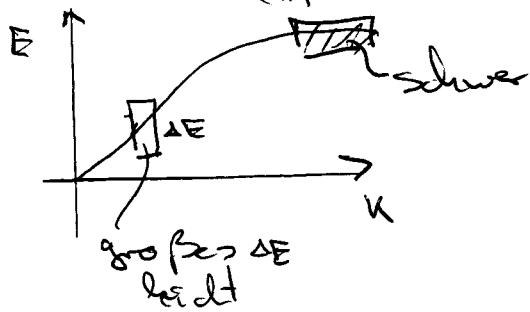
$$\tilde{\sigma} = -\frac{2e^2}{(2\pi)^3} \frac{\tau(E_F)}{\hbar} \int_{BZ} d^3k v(k) \propto f(k, T)$$

\downarrow part. Ent.

$$= \frac{2e^2}{(2\pi)^3} \frac{\tau(E_F)}{\hbar} \int_{BZ} d^3k \underbrace{\nabla_k v(k) \cdot f_0(k, T)}_{=\frac{1}{4} \frac{\partial^2 E}{\partial k_x \partial k_y}}$$

\downarrow part. Ent.

$$= \frac{2e^2}{(2\pi)^3} \tau(E_F) \int_{BZ} d^3k \left(\frac{1}{m^*}\right) f_0(k, T)$$



$$\tilde{\sigma} = -eE$$

$$\Delta E(k) \text{ klein}$$

$$\tilde{\sigma} \sim \left(\frac{1}{m^*}\right)$$

Leitfähigkeit ist invers zur effektiven Masse

σ in freiem Elektronengas

$$\left(\frac{1}{\tau_{\text{free}}}\right) = \frac{1}{m^*}$$

$$\begin{aligned} \sigma &= \frac{2e^2}{(2\pi)^3} \tau(E_F) \cdot \frac{1}{m^*} \sum_{\text{BZ}} d^3 k \ f_0(k, T) \\ &= \frac{e^2 \cdot \tau(E_F)}{m^*} \cdot n \end{aligned}$$

$$j = \sigma E = \frac{e^2 \tau(E_F)}{m^*} n \cdot E$$

$$j = n \cdot e v$$

$$v = \mu \cdot E ; \quad \mu = \frac{e \cdot \tau}{m^*} \quad \text{Beweglichkeit } \mu$$

$$D(E_F) = \frac{3}{2} \cdot \frac{\pi}{E_F} \quad \text{Zustandsdichte des freien } e^- \text{-Gases am Fermienergielinien}$$

$$\begin{aligned} \rightarrow \sigma &= \frac{2}{3} D(E_F) \cdot E_F \cdot \frac{e^2}{m^*} \cdot \tau(E_F) \\ &\quad \downarrow \\ &\quad \frac{1}{2} m^* v_F^2 \end{aligned}$$

$$= \frac{1}{3} D(E_F) v_F^2 e^2 \tau(E_F)$$

Stoßzeit τ

$$\tau_{\text{Metalle}} \sim 10^{-14} \text{ s}$$

Beitrag:

- Defekte (konstant, unabh. von T)

- Phonone : $\tau_{\text{ep}} \sim \frac{C}{T} \quad (n \sim \frac{T}{\Theta})$

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_0} + \frac{1}{\tau_{\text{ep}}} \quad \text{die Stoßraten addieren sich}$$

$\rho = \gamma_0$ spez. Widerstand

$\rho = \rho_0 (\alpha + \beta T)$ Matthiesen Regel

$$\rho_{\text{air}} \sim 10^{-6} \Omega \text{ cm}^{-1}$$

für niedrige Temp. $\rho \sim \left(\frac{T}{T_0}\right)^5$ (Phonone
bei hohen Temp.)

je besser ein Metall Wärme leitet, desto
besser leitet es auch Strom

Thermische Leitfähigkeit

$$\vec{J}_Q = -\lambda \cdot \nabla T$$

$$\lambda_{ph} = \frac{1}{3} C_v^{\text{ph}} \cdot c^2 \cdot \tau^{\text{ph}}$$

Phononen (siehe vorherige Herl.)

analog:

$$\lambda_{el} = \frac{1}{3} C_v^{\text{el}} \cdot v_F^2 \cdot \tau_{el}$$

$$\text{freies Elektronengas: } \omega^{\text{el}} = \frac{\pi^2}{3} k_B T \cdot D(E_F)$$

$$\rightarrow \lambda_{el} = \frac{1}{3} \frac{\pi^2}{3} k_B T D(E_F) \cdot v_F^2 \cdot \tau_{el}$$

$$D(E_F) = \frac{3}{2} \cdot \frac{\pi}{E_F} ; E_F = \frac{1}{2} \cdot m^* v_F^2$$

$$\lambda_{el} = \frac{1}{3} \frac{\pi^2}{2} k_B T \cdot \frac{2m}{m^*} \cdot \tau_{el} = \frac{\pi^2}{3} k_B T \cdot \frac{m}{m^*} \tau_{el}$$

$$\text{vgl. } \sigma_{el} = \frac{n e^2 \cdot \tau}{m^*}$$

$$\tau_{el} = \tau_{ph} :$$

$$\boxed{\frac{\lambda_{el}}{\sigma} = \frac{\pi^2}{3} \frac{k_B^2}{e^2} \cdot T = \frac{1}{3} \left(\frac{n k_B}{e} \right)^2 \cdot T}$$

$$= 2,45 \cdot 10^{-8} \frac{\Omega \text{W}}{\text{K}^2} \cdot T$$

zusammenh.
zwischen thermischer
u. elektr. Leitfäh.
Wiedemann - Franz
Sches Gesetz
 \rightarrow linearer Zusammenhang

$$\text{Bsp.: } T = 300 \text{ K}$$

$$\lambda_{ph} = \frac{1}{3} C_v^{\text{ph}} \cdot c^2 \cdot \tau^{\text{ph}}$$

$$1 \cdot (10^3 \frac{\text{W}}{\text{K}})^2$$

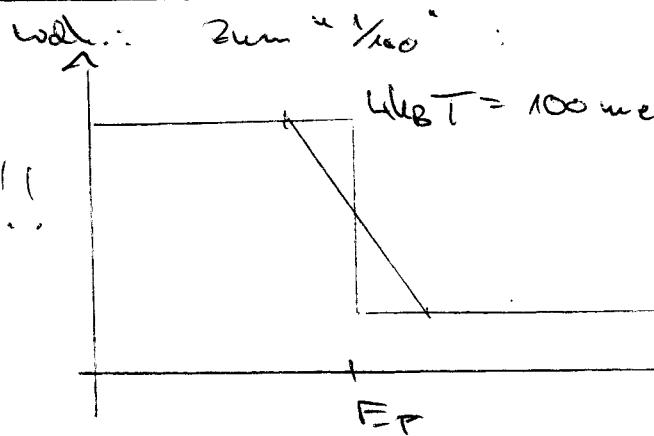
$$\lambda_{el} = \frac{1}{3} C_v^{\text{el}} \cdot v_F^2 \cdot \tau_{el}$$

$$\frac{1}{100} (10^6 \frac{\text{W}}{\text{K}})^2$$

$$\tau_{el} \sim \tau_{ph}$$

$$\text{wobei } C_v^{\text{el,ph}}$$

\Rightarrow Wärme steckt zwar nur in den Phononen, aber Wärmtransport geschieht durch Phononen und Elektronen gleichmaßen



$$\text{Pee } u \cdot \frac{k_B T}{E_F} \cdot \frac{100 \text{ meV}}{10 \text{ eV}} \sim \frac{1}{100} u$$

$$\text{Plan. } 3_u = \frac{1}{(2\pi)^3} \sum_s \sum_{B2} d_q^3$$

$$\text{Fr. } n = \frac{2}{(2\pi)^3} \sum_{\text{Bänder } B_2} \underbrace{d^3 k}_{(2\pi)^3 / V_{k2}}$$

$$\frac{N_{\text{el}, E2}}{V_{E2}} = u_{\text{el}} = \frac{2}{(2\pi)^3} \cdot \frac{(2\pi)^3}{V_{k2}} = 2 \cdot \frac{1}{V_{E2}} \cdot (\text{Zahl der Bänder})$$

$N = 2 \cdot \text{Zahl der Bänder}$

- - -

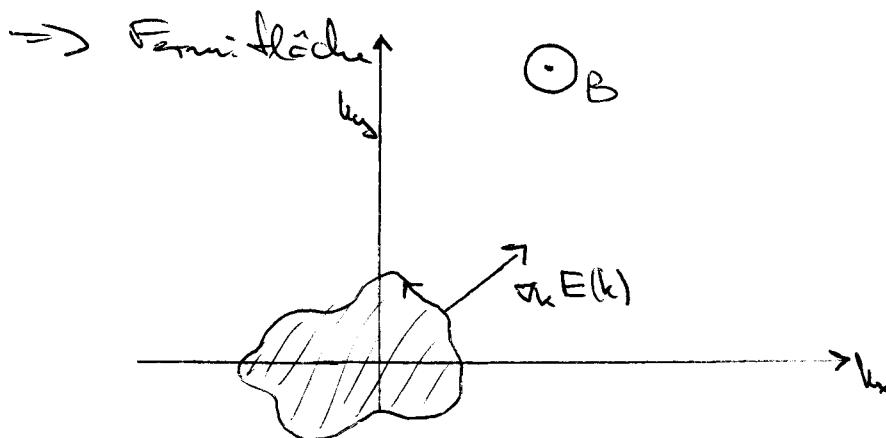
Bewegung von Ladungsträgern im Magnetfeld

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{k}} &= -e(\mathbf{v} \times \mathbf{B}) \\ \ddot{\mathbf{r}} &= \frac{1}{m} \nabla_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k}) \end{aligned} \quad \left. \begin{array}{l} \dot{\mathbf{k}} \perp \nabla_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k}) \\ \ddot{\mathbf{r}} = 0 \end{array} \right\}$$

$$\ddot{\mathbf{E}}(\mathbf{k}) = \nabla_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k}) \cdot \dot{\mathbf{k}} = 0$$

$$E(\mathbf{k}) = \text{const}$$

Elektronen bewegen sich auf Bahnen konstanter Energie $E(\mathbf{k})$, und mit $\dot{\mathbf{k}}$ senkrecht zum Magnetfeld (im k -Raum)



$$\text{Umfangssinn: } \nabla_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k}) > 0 \quad \hat{=} \text{ Elektronen}$$

Umlaufbahn im Magnetfeld: Periode

$$T = \int dt = \frac{\hbar^2}{eB} \oint \frac{d\mathbf{k}}{|\nabla_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k})|_L}$$

$$|\nabla_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k})|_L = \frac{dE}{dk_L}$$

$$T = \frac{\hbar^2}{eB} \cdot \frac{\partial A(E, k_2)}{\partial E}$$



$$\text{klassisch, freies Elektron: } m^* \omega^2 r = e \omega \cdot r \cdot B$$

$$\omega_c = \frac{eB}{m^*} \text{ Zyklotronfrequenz}$$

$$T = \frac{2\pi}{\omega}$$

$$\omega_c = \frac{2\pi}{\hbar} \cdot eB \cdot \frac{\hbar}{\partial A / \partial E} ; m^* = \frac{\hbar^2}{2\pi} \cdot \frac{\partial A}{\partial E}$$

Zylindermasse

Bsp. Kugel

$$\text{Fläche Kreis } A = \pi l^2 \\ E = \frac{\hbar^2}{2m} l^2$$

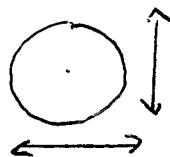
$$\frac{\partial A}{\partial E} = \frac{\pi \cdot 2l}{\hbar^2}$$

$$\rightarrow m^* = m$$

Durch Anlegen eines Magnetfelds kann man die Topologie der Fermifläche ermitteln

$\hbar \omega_c \sim 0,1 \text{ meV}$ bei $1T \rightarrow$ Mikrowellen

"Übergang zur Quantenmechanik



Kreisbewegung: Überlagerung zweier Schwingungen, die um $\frac{\pi}{2}$ phasenverschoben sind.

$$E = E(k_z) + \hbar \omega_c (v + \frac{1}{2}) ; v = 0, 1, 2, \dots$$

$E = E_F \rightarrow 10 \text{ eV}$ Energie des Elektrons bei E_F

$\hbar \omega_c (1 \text{ Tesla}) \sim 0,1 \text{ meV} \Rightarrow \rightarrow$ riesig!

\Rightarrow Korrespondenzprinzip anwendbar

die Ladungsträger, die zur ~~Oszillation~~ beitragen
Absorption von Mikrowellen beitragen bei E_F liegen!

Durch Anlegen des Magnetfeldes \vec{B} folgt ein
Symmetriebrech (Bruch der Translationssymm.)
 \Rightarrow Beschreibung über k_x und v , nicht über
 $\vec{k} = k_x, k_y, k_z$ (Blochwelle)

$$\vec{p} = \vec{p}_0 + \frac{e}{c} \vec{A} \rightarrow p_x + p_y$$

$$\vec{B} = \vec{v} \times \vec{A} \quad ; \quad A = \frac{1}{2} (\vec{r} \times \vec{B}) \quad ; \quad \vec{B} = (0, 0, B) \\ A \rightarrow A_x, A_y$$

Variation des Magnetfeldes

$$E_F - E^*(k_z) = (v + \frac{1}{2}) \omega_c t = (v + \frac{1}{2}) t \omega'$$

$v' = v + 1$ wählen (ein Landau-Zylinder durch die Fermifläche geschoben)

$$E_F - E^*(k_z) \left(\frac{1}{t \omega_c} - \frac{1}{t \omega_c'} \right) = 1 \quad ; \quad \omega_c = \frac{eB}{m^*}$$

$$\frac{1}{B'} - \frac{1}{B} = \frac{t e}{m^*} \frac{1}{E_F - E^*(k_z)}$$

$$\Delta\left(\frac{1}{B}\right) = \text{const.} \quad ; \quad \Delta\left(\frac{1}{B'}\right) = \frac{\Delta B}{B^2}$$

Suszeptibilität χ hängt von Elektronen bei E_F ab
dss. Leitfähigkeit

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m} k_F^2 \quad ; \quad E^*(k_z) = 0 \quad \text{frees Elektron}$$

$$\text{Leitfähigkeit } \Delta\left(\frac{1}{B}\right) = \frac{t e}{m^*} \frac{m^*}{\hbar^2 k_F^2} = \frac{2 \pi e}{\hbar} \frac{1}{A_F}$$

Magnetismus

äußeres Feld: \vec{H}

$$\vec{B} = \mu_0 \cdot \vec{H} + \mu_0 \cdot \vec{M}$$

magn. Induktion: \vec{B}

Magnetisierung: \vec{M}

$$\vec{M} = \chi \vec{H} \quad ; \quad \chi: \text{Suszeptibilität}$$

$\chi < 0$ Diamagnetismus

$\chi > 0$ Paramagnetismus

$\chi \gg 1$ "Ferromagnetismus"

Hom. ein äußeren Feld

$$\vec{H} = \frac{(\vec{P} + e\vec{A})^2}{2m} \quad ; \quad \vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A} \quad ; \quad \text{Lorentzbeziehung } \vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$$

$$\vec{B}_0 = (0, 0, B_0) \quad \text{homog.}, B_0 = \text{const}$$

$$\vec{A} = -\frac{1}{2} (\vec{r} \times \vec{B})$$

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{\vec{p}^2}{2m} + \frac{e}{m} \vec{A} \cdot \vec{p} + \frac{e^2}{2m} \vec{A}^2 \quad \leftarrow \text{Erläuterung geht ein} \\ &= \frac{\vec{p}^2}{2m} + \underbrace{\frac{e}{m} \cdot \frac{1}{2} (\vec{r} \times \vec{B}) \cdot \vec{p}}_{\vec{E}_{ik} r_i B_k p_i} + \frac{e^2}{2m} \frac{1}{4} (\vec{r} \times \vec{B})^2 \end{aligned}$$

$$= \frac{\vec{p}^2}{2m} + \frac{e^2}{2m} (\vec{r} \times \vec{B}) \vec{B} + \frac{e^2}{8m} (\vec{r} \times \vec{B})^2$$

$$B = B_0 \cdot \vec{e}_z \cdot e^{i\omega t}$$

$$= \frac{\vec{p}^2}{2m} + \frac{e^2}{2m} L_z \cdot B_0 + \frac{e^2}{8m} (x^2 + y^2) \cdot B^2$$

$$E = -\vec{m} \cdot \vec{B} \quad ; \quad E = \langle \hat{H} \rangle$$

$$\vec{m} = -\frac{\partial \langle \hat{H} \rangle}{\partial B}$$

Paramagnetismus

$$\langle m \rangle = -\frac{e\hbar}{2m} \cdot \langle L_z \rangle, \quad L_z = m_z \cdot \hbar$$

$x > 0$

$$\frac{e\hbar}{2m} = 0,579 \cdot 10^{-4} \frac{\text{eV}}{\text{Tesla}} \quad (\text{Bohrsches Magneton})$$

Meiner Beitrag!

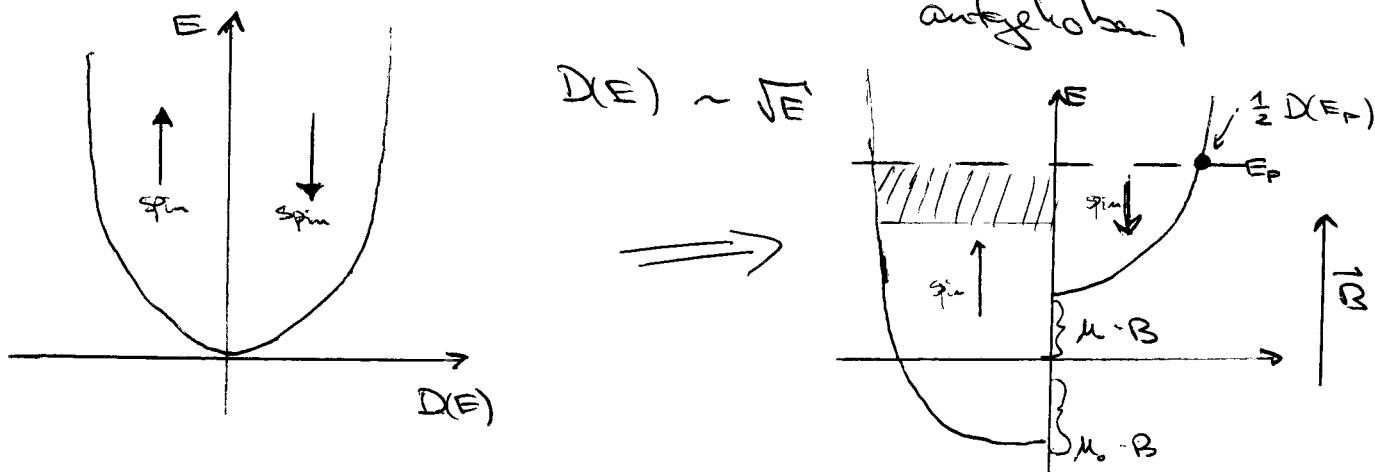
Diamagnetismus

$x \approx 0$

$$\begin{aligned} \langle m \rangle &= -\frac{c^2}{4m} \langle x^2 + y^2 \rangle \cdot B \\ &= -\frac{2}{3} \frac{c^2}{4m} \langle r^2 \rangle \cdot B \\ &= -\frac{c^2}{6m} \langle r^2 \rangle \cdot B \end{aligned}$$

Pauliparamagnetismus freie Elektronen

$\langle L_z \rangle = 0$, $\langle r^2 \rangle$ nicht definiert (Kugelsymmetrie aufgehoben)



$$U = -\vec{m} \cdot \vec{B}$$

$$= g \cdot S \cdot \mu_B \cdot B_z$$

$$m = \pm g \mu_B \cdot \frac{1}{2}$$

$$U = \pm g \mu_B \cdot \frac{1}{2} \cdot B_z = \pm \mu_B B$$

Ein Band wird angehoben, eins herabgesetzt

$$\vec{M} = \vec{m} \cdot D(E_F) \cdot 2\mu_B \cdot B \cdot \frac{1}{2} \quad ; \quad \vec{m} = \text{magn. Moment eines Elektrons}$$

$$= 2\mu_B^2 D(E) \cdot B \cdot \frac{1}{2}$$

$$= \mu_B^2 \cdot D(E_F) \cdot B$$

$$\chi_{\text{Pauli}} = \mu_0 \mu_B^2 \cdot D(E_F)$$

unabhängig von der Temperatur!

$$\chi_{\text{Pauli}} (\text{Aluminum}) = 1,25 \cdot 10^{-6}$$

and Domagnetismus möglich bei freien Elektronen

$$\chi_{\text{dia}} = -\frac{1}{3} \chi_{\text{Pauli}} \left(\frac{m}{m^*} \right)^2 \quad \text{im Halbleiter messbar}$$

Austauschwechselwirkung

3.7.06

a) Wasserstoffmolekül

1,2 Elektron an Atom A, B

$$\Psi_S(1,2) = \psi_A(1) \psi_B(2) + \psi_A(2) \psi_B(1)$$

symmetrisch

$$\text{sing } \Psi_S = \begin{bmatrix} \psi_A(1) \psi_B(2) & \psi_A(2) \psi_B(1) \end{bmatrix} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} [\Psi_{\uparrow\downarrow} - \Psi_{\uparrow\uparrow}]$$

$$\text{trippl } \Psi_a = \begin{bmatrix} & - & - & - & - \end{bmatrix} \cdot \begin{cases} |1\uparrow\uparrow\rangle \\ \frac{1}{\sqrt{2}} [|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle] \\ |1\downarrow\downarrow\rangle \end{cases}$$

$$S = S_1 + S_2$$

$$S = \begin{cases} 0 & \text{Singulett} \\ 1 & \text{triplett} \end{cases}$$

$$S \cdot (S+1) = \begin{cases} 0 & E_S \\ 2 & E_T \end{cases}$$

Hamilton:

$$H_{\text{spin}} = E_S + (E_T - E_S) \cdot \langle S^2 \rangle$$

$$S^2 = S_1^2 + S_2^2 + 2S_1 \cdot S_2$$

$$H_{\text{spin}} = E_S + \frac{3}{4} (E_T - E_S) + \underbrace{(E_T - E_S)}_{:= J} \cdot S_1 \cdot S_2$$

J: Anstandswechselwirkung,
= Energiedifferenz zw. Singulett u. Triplet

$$H_{\text{spin}}^* = -J S_1 \cdot S_2$$

Verallgemeinerung auf Ensemble von Spins

$$H = - \sum_{i>j} J_{ij} S_i \cdot S_j$$

$$= - \sum_{\substack{i,j \\ \text{in Wg.} \\ \text{von}}} S_i J_{ij} S_j^{(i)}$$

Komplizierter Hamilton (Heisenberg Hamiltonian)
beschreibt die Wechselwirkung lokalisierter
Spins

$$\begin{aligned} 4_{S/T} &= e^{i\vec{k}_1 \vec{r}_1} \cdot e^{i\vec{k}_2 \vec{r}_2} + e^{i\vec{k}_1 \vec{r}_2} \cdot e^{i\vec{k}_2 \vec{r}_1} \\ &= e^{i\vec{k}_1 \vec{r}_1} \cdot e^{i\vec{k}_2 \vec{r}_2} (1 \pm e^{i(k_1(F_2 - F_1))} \cdot e^{-i(k_2(F_2 - F_1))}) \end{aligned}$$

$$|4_{S/T}|^2 = 2 \pm 2 \cos[(k_1 - k_2)(\vec{r}_2 - \vec{r}_1)]$$

$$|4_T|^2_{\vec{r}_1 = \vec{r}_2} = 0 \quad \text{zwei Elektronen sind nicht an gleichen Ort}$$

$$|\psi_{k_1 k_2}|^2 \xrightarrow[\text{Fermiholegr. } k_1, k_2]{\text{integrieren}} r_1=0 \quad r_2=0 \Rightarrow \text{Holeschloch}$$

Zusätzliche Terme: $\varphi_A(1) \varphi_A(2)$ od $\varphi_B(1) \varphi_B(2)$

würden zu Korrelationseffekten (Korrelationsloch) führen

$$\bar{E}(k) = E^\circ(k) - I \frac{n_\uparrow}{n}$$

$$\downarrow \quad \bar{E}(k) = E^\circ(k) - I \frac{n_\downarrow}{n}$$

Stoner - Wolfarth Modell

$$n = n_\uparrow + n_\downarrow$$

$$S := \frac{n_\uparrow - n_\downarrow}{n} \quad n \pm S := \frac{n_\uparrow + n_\downarrow}{n} - \frac{n_\uparrow - n_\downarrow}{n} = 2 n_S$$

$$E(k)_{\uparrow\downarrow} = E_0(k) - \frac{\tilde{I}}{2} (1 \pm S)$$

$$= \begin{cases} E_0(k) - \frac{\tilde{I}}{2} \mp \frac{S\tilde{I}}{2} \\ \tilde{E}(k) \end{cases}$$

also

$$E(k)_\uparrow = \tilde{E}(k) - \frac{\tilde{I} \cdot S}{2}$$

$$E(k)_\downarrow = \tilde{E}(k) + \frac{\tilde{I} \cdot S}{2}$$

Konsistenzbedingung

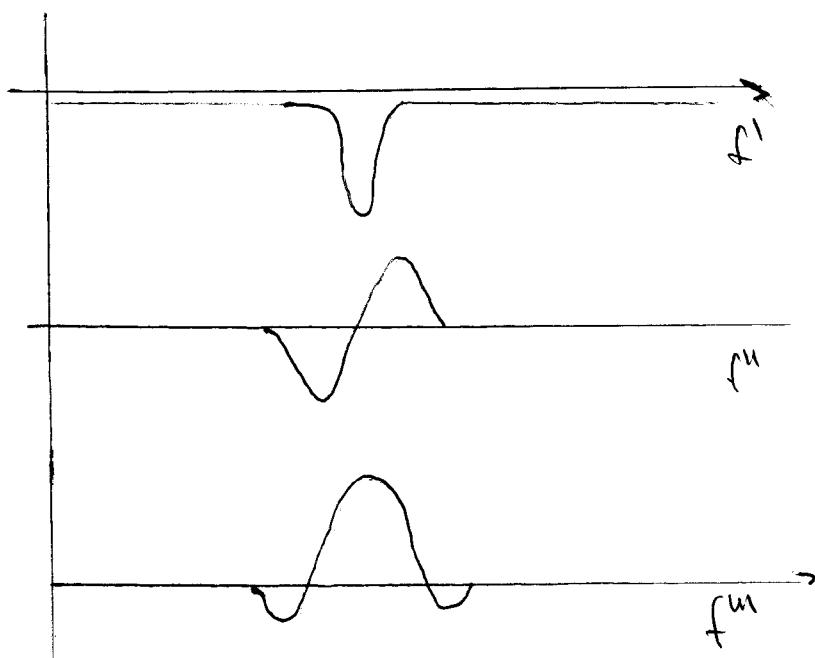
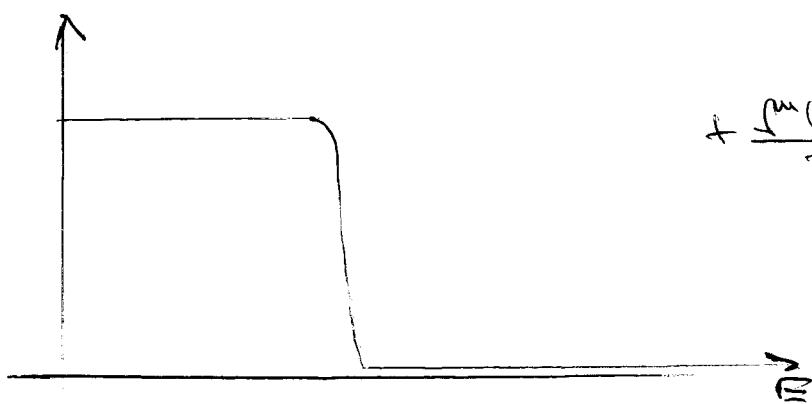
$$\Sigma = \frac{n_\uparrow - n_\downarrow}{n} = \frac{1}{2} \left[\int dE \frac{D(E)}{2} f(E - \frac{IS}{2}) - \int dE \frac{D(E)}{2} f(E + \frac{IS}{2}) \right]$$

für $S \neq 0 \Rightarrow$ Spontane Magnetisierung

I wird als der Störungsparameter bezeichnet

$$\frac{IS}{2} \ll E_F$$

$$f(E - \frac{IS}{2}) - f(E + \frac{IS}{2}) = f'(E) \cdot (-IS) + f''(E) \cdot \underbrace{\frac{1}{2!} \left[\left(\frac{IS}{2} \right)^2 - \left(\frac{-IS}{2} \right)^2 \right]}_{\propto \frac{IS^2}{2}} + \frac{f'''(E)}{3!} \left(-\frac{IS}{2} \right)^3 \cdot 2$$



Stoer Kriterium $S \neq 0$ (mag. ordnungs)

$$I \cdot D(E_F) > 1$$

Temperaturabhängigkeit

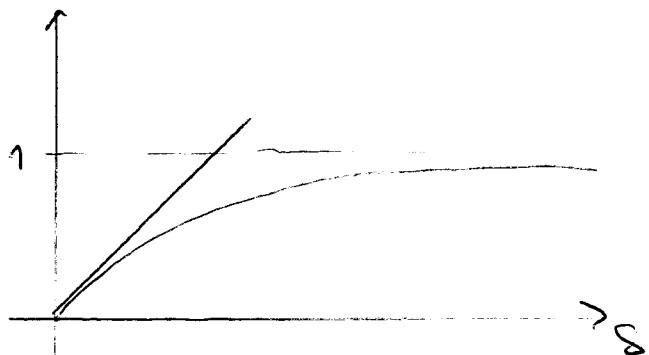
Näherung: $D(E) = c \cdot \delta(E - E_F)$

$$S = c \left[\frac{1}{e^{-\frac{IE}{2kT}} + 1} - \frac{1}{e^{\frac{IE}{2kT}} + 1} \right]$$

$$= c \tanh \frac{IE}{4kT}$$

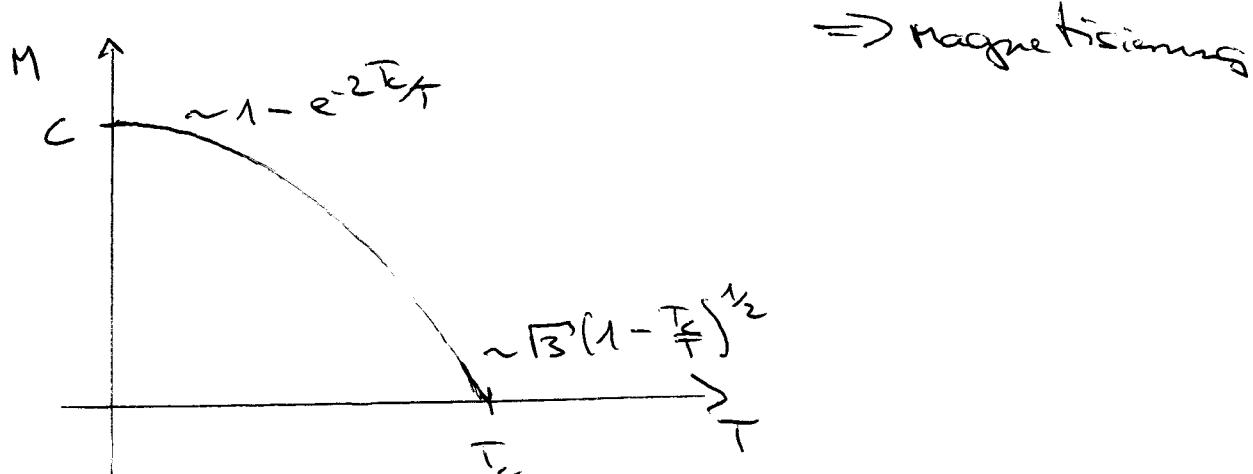
$$\tanh x \approx x - \frac{x^3}{3} : \text{für kleine } x$$

$$\tanh x \approx 1 - e^{-2x} : \text{für große } x$$



$$1 \leq \frac{Ic}{4kT} \Rightarrow T_c = \frac{T_c}{Ic}$$

$$T < T_c = \frac{I \cdot c}{4k}$$



\Rightarrow Magnetisierung

Abhängigkeiten sind modellbehaftet und falsch
(aber grober Verlauf stimmt)

$T \rightarrow T_c$: paramagnetischer Fall

$$IS \rightarrow IS + \mu_B B \ll kT$$

$$S = c \left[\frac{1}{1 - \frac{IS + \mu_B}{2kT} + 1} - \frac{1}{1 + \frac{IS + \mu_B}{2kT} + 2} \right]$$

$$\frac{dS}{c} = \frac{2 \cdot \frac{IS + \mu_B}{2kT}}{4 - 4(-\dots)^2}$$

$$= \frac{cIS}{ckT} + \frac{\mu_B B}{4kT}$$

$$\frac{dS}{c} \left(1 - \frac{T_c}{T}\right) \rightarrow \frac{\mu_B \cdot B}{4kT}$$

$$S = \frac{1}{T - T_c} \cdot \frac{\mu_B}{4k} \cdot B \quad ; \quad S = \frac{n\uparrow - n\downarrow}{n} n\uparrow$$

$$\Rightarrow \chi = \frac{c^*}{T - T_c} \rightarrow \text{ferromag.}$$

Molekulare Feldnäherung

$$H = \sum_i \sum_s J_{is} s_i s_i^* + \mu_B g \cdot B \sum_i s_i$$

$$= \sum_i \sum_s J_{is} s_i s_i^* \langle s_i^* \rangle + \mu_B g \cdot B \cdot \sum_i s_i$$

$$= \sum_i s_i \underbrace{\left(\sum_s J_{is} s_i^* \langle s_i^* \rangle + \mu_B g \cdot B \right)}_{\mu_B g \cdot B_{MF}}$$

$$H = \sum_i s_i (\mu_B g \cdot B_{MF} + B_{ext})$$

$$\mu_0 M = \int \mu_B \langle s \rangle$$

$$M \propto n_\uparrow - n_\downarrow$$

$$n_\uparrow \sim e^{-\mu_B g \cdot \frac{1}{2} (B_{\text{RF}} + B_{\text{ext}}) / kT}$$

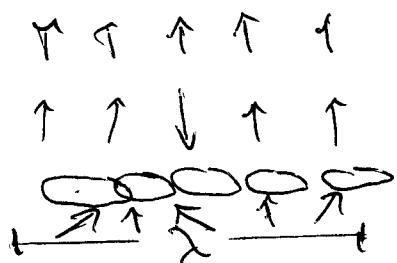
$$n \sim e^{-M/kT}$$

$$n = \frac{1}{2} g \mu_B \cdot n \cdot \tanh\left(\frac{1}{2} g \mu_B (B_{\text{RF}} + B_{\text{ext}}) / kT\right)$$

\Rightarrow gleiches Verhalten wie Stoner-Wolffarth

Spinwellen

5.7.06



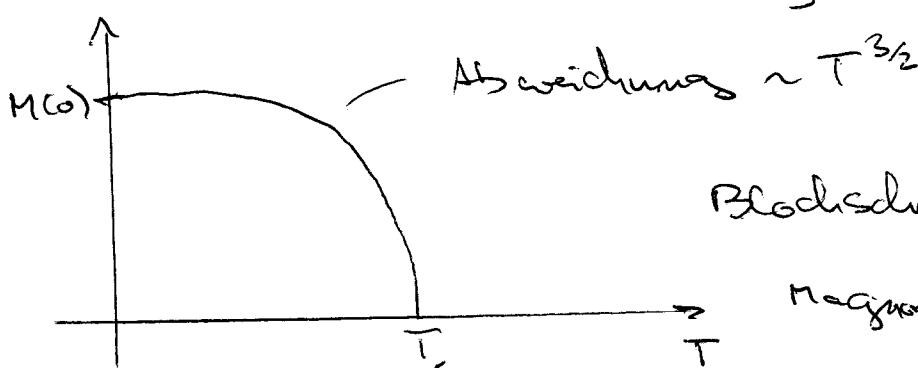
Ferromagn. Grundzustand
Stoner Energien

Spinwelle $\omega(q), q$

$\hat{=}$ Magnon & Quasimodus
 $\hbar \omega(q)$ Energie

$$\lambda \rightarrow \infty, q \rightarrow 0, \omega(q) \rightarrow 0$$

$$\omega = (2 \beta S \alpha^2) \cdot q^2 \quad : \quad \begin{aligned} \alpha &: \text{Gitterkonstante} \\ \beta &: \text{Wechselwirkung} \\ S &: \text{Spin} \end{aligned}$$



Bloch'sches Gesetz

Magnone $\hat{=}$ Boson

$$\langle n_2 \rangle_{\text{Magnone}} \sim T^{3/2}$$

Antiferromagnetische Ordnung

$$T_N \approx -\frac{1}{4} \frac{VJ}{k_B}$$

Néel - Temperatur \Rightarrow antiparalleler
Antiferromag. \rightarrow Paramagn. Spinordnung

Halbleiter

- Wellenvektor Licht: $k \sim 10^3 \frac{\text{m}}{\text{a}}$
 \Rightarrow vertikale Übergänge von Elektronen bei
 Absorption elektromagn. Strahlung
 im sichtbaren W-Spektralbereich
- direkte Bandlücke
 Leitungsbandminimum u. Valenzbandmaximum bei
 gleicher k (Γ , $k=0$) Graf.
- indirekte Bandlücke
 Si, Ge
- effektive Masse $m_{holes} \neq m_e$

$$\frac{1}{m_{ij}} = \frac{1}{\pi^2} \frac{\partial E}{\partial k_i \partial k_j}$$
- III - IV H: kovalente Bindung
 fcc: $t_1 = (0, 0, 0)$ $g_F \rightarrow A_c$
 $t_2 = \left(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4} \right)$ ionischer Anteil gering

Ladungsträgerdichte in intrinsischen Halbleitern

intrinsisch = ohne Defekte (nicht dotiert)

frei Ladungsträger entstehen nur durch Anregung aus dem Valenzband (V, VB) in das Leitungsband (LB, CB, C) \Leftrightarrow conduction

Annahme: parabolische Bänder mit effektiven Massen

$$m_h^*(VB); m_e^*(CB)$$

Zustandsdichte:

$$D_{CB}(E) = \frac{(2m_e^*)^{3/2}}{2\pi^2 t^3} \sqrt{E - E_{CB}} \quad ; \quad E > E_{CB}$$

$$D_{VB}(E) = \frac{(2m_h^*)^{3/2}}{2\pi^2 t^3} \sqrt{E_{VB} - E} \quad ; \quad E < E_{VB}$$

$$n = \sum_{E_{CB}}^{\infty} dE D_{CB}(E) \cdot f(E, T) \quad \text{Anzahl der Elektronen}$$

$$p = \sum_{-\infty}^{E_{VB}} dE D_{VB}(E) \cdot (1 - f(E, T)) \quad \text{Anzahl der Löcher}$$

Fermiverteilung kann im HL durch Boltzmannverteilung approximiert werden, da $E_{CB} - E_F \gg kT$, $E_F - E_{VB} \gg kT$

$$\frac{1}{e^{(E - E_F)/kT + 1}} \sim e^{-(E - E_F)/kT}$$

$$n = \int_{E_{CB}}^{\infty} dE \cdot \frac{(2m_e^*)^{3/2}}{2\pi^2 h^3} \cdot \sqrt{E - E_{CB}} \cdot e^{-(E - E_{CB})/kT} \cdot e^{-(E_{CB} - E_F)/kT}$$

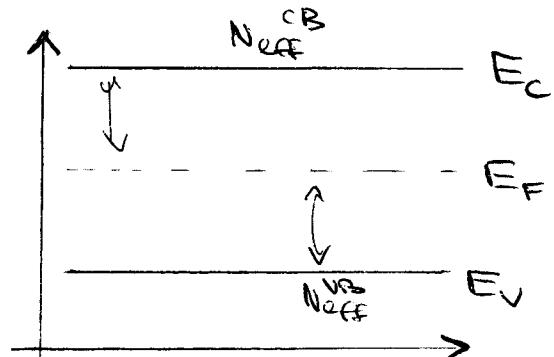
$$= \frac{(2m_e^*)^{3/2}}{2\pi^2 h^3} e^{-(E_{CB} - E_F)/kT} \cdot (hT)^{3/2} \underbrace{\int_0^{\infty} dx^{1/2} e^{-x}}_{\frac{\sqrt{\pi}}{2}}$$

$$n = 2 \left(\frac{m_e^* hT}{2\pi k^2} \right)^{3/2} \cdot e^{-(E_{CB} - E_F)/kT}$$

$$p = 2 \left(\frac{m_h^* hT}{2\pi k^2} \right)^{3/2} \cdot e^{-(E_F - E_{VB})/kT}$$

$$n = N_{eff}^{CB} \cdot e^{-(E_{CB} - E_F)/kT}$$

$$p = N_{eff}^{VB} \cdot e^{-(E_F - E_{VB})/kT}$$



"Massenwirkungsgesetz" des Halbleiters:

$$n \cdot p = N_{eff}^{CB} \cdot N_{eff}^{VB} \cdot e^{-(E_{CB} - E_F)/kT} \cdot e^{-(E_F - E_{VB})/kT} \underbrace{e^{-(E_{CB} - E_{VB})/kT}}$$

$$= N_{eff}^{CB} \cdot N_{eff}^{VB} \cdot e^{-E_{gap}/kT}$$

Bei konstanter Temperatur ist auch $n \cdot p$ konstant

$$n \cdot p = f(T) \rightarrow p = \frac{f(T)}{n}$$

im intrinsischen HL: $n_i = p_i = \sqrt{N_{eff}^{CB} \cdot N_{eff}^{VB}} \cdot e^{-E_{gap}/2kT}$

$$\frac{p_i}{n_i} = 1 = \frac{N_{eff}^{VB}}{N_{eff}^{CB}} \cdot e^{-(E_F - E_{VB})/kT} \cdot e^{-(E_{CB} - E_F)/kT}$$



$$e^{2E_F/kT} = \frac{\frac{N_{\text{eff}}^{\text{VB}}}{N_{\text{eff}}^{\text{CB}}}}{N_{\text{eff}}} \cdot e^{(E_{\text{CB}} + E_{\text{VB}}) / kT}$$

$$E_F(T) = \frac{E_{\text{CB}} + E_{\text{VB}}}{2} + \frac{kT}{2} \ln \frac{\frac{N_{\text{eff}}^{\text{VB}}}{N_{\text{eff}}^{\text{CB}}}}{N_{\text{eff}}^{\text{LB}}}$$

Fermi niveau im intr. HL:

$$E = \frac{E_{\text{gap}}}{2} + \frac{3}{4} kT \ln \frac{m_h^*}{m_e^*}$$

Leitfähigkeit:

10^{10} cm^{-3} vergleiche restall 10^{22} cm^{-3}

\Rightarrow Dotierung des HL

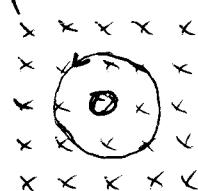
5-wertig	\rightarrow	Donator
3-wertig	\rightarrow	Akzeptor

10.7.06 Dotierte Halbleiter

Einfachste Näherung für Donor / Akzeptor:

Wasserstoffatom in Si-Umgebung

$$\begin{aligned} m &\rightarrow m^* & : & \sim 0.1 m_e \\ \epsilon_0 &\rightarrow \epsilon \epsilon_0 & : & \epsilon \sim 13-15 \end{aligned}$$



$$E_n = \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{e^2}{4\pi \epsilon \epsilon_0 h} \right)^2 \cdot \frac{1}{n^2} \quad \text{H-Energie niveaus}$$

$$\approx 0.5 \text{ meV} \quad (\text{ge: } \epsilon = 15.8 ; \frac{m^*}{m} = 0.12)$$

Bindungsenergie muss den Abstand zw. Fermi niveau und Leitungsband überbrücken

Akzeptorniveau

$$\text{Bohrscher Radius } r_h = \frac{4\pi \epsilon_0 \epsilon h}{e^2 n^2} = 0,529 \text{ \AA} \quad \frac{\epsilon}{\text{a.u.}} = 70 \text{ \AA} (\text{Ge})$$

\Rightarrow $r_{\text{groß}}$ \rightarrow Verzerrung durch makroskopische Größe ϵ ist o.k.
 $(r \gg a \text{ Gitterkonstante})$

Fermi-Energie liegt zwischen Donor-level und Leitungsband (bzw. zw. Acceptor-level und Valenzband)

Ladungsträgerkonzentration in dotierten HL

$T = \infty$ sind alle Donator niveaus besetzt / Akzeptorniveaus unbesetzt

$$k_B T \approx \begin{cases} E_c - E_D = E_d & \text{alle Elektronen im LB} \quad n \approx n_0 \\ E_A - E_V & \text{alle Löcher im VB} \quad p \approx n_A \\ & \text{Erholung in A. N. sein} \end{cases}$$

$$\sigma \propto = n \cdot e \mu_n + p \cdot e \cdot \mu_p \quad \text{"Erschöpfung"} \sim 300 \text{ K}$$

Variation d. Dotierungsdichte führt direkt zu einer Variation der Leitfähigkeit σ

Gruppe Ladungsträgerkonzentration:

n-Halbleiter

$$N_D^+ = N_D \left(1 - \frac{1}{e^{(E_D - E_F)/kT} + 1} \right)$$

$$\Rightarrow N_D \frac{1}{e^{(E_P - E_D)/kT} + 1}$$

\uparrow
NZ umgedreht

Ladungsträgerneutralität

$$n + (n_D^-) = p + n_D^+$$

$$\overbrace{\quad \quad \quad \quad}^n - \overbrace{\quad \quad \quad \quad}^p$$

$$n \cdot p = n_c^{\text{eff}} N_v^{\text{eff}} e^{-E_{\text{F}}/kT}$$

Näherung

$$N_D \gg n_D \rightarrow n \approx N_D^+ = N_D \frac{1}{e^{(E_p - E_F)/kT} + 1}$$

$$n = n_c^{\text{eff}} \cdot e^{-(E_F - E_F)/kT}$$

$$\frac{n}{N_{\text{eff}}} \cdot e^{E_F/kT} = e^{E_F/kT}$$

$$\rightarrow n = N_D \frac{1}{\frac{n}{N_{\text{eff}}} e^{(E_F - E_D)/kT} + 1}$$

$$= N_D \frac{1}{\frac{n}{N_{\text{eff}}} e^{E_D/kT} + 1} ; E_d := E_F - E_D$$

$$\frac{n^2}{N_{\text{eff}}} e^{E_D/kT} + n - N_D = 0$$

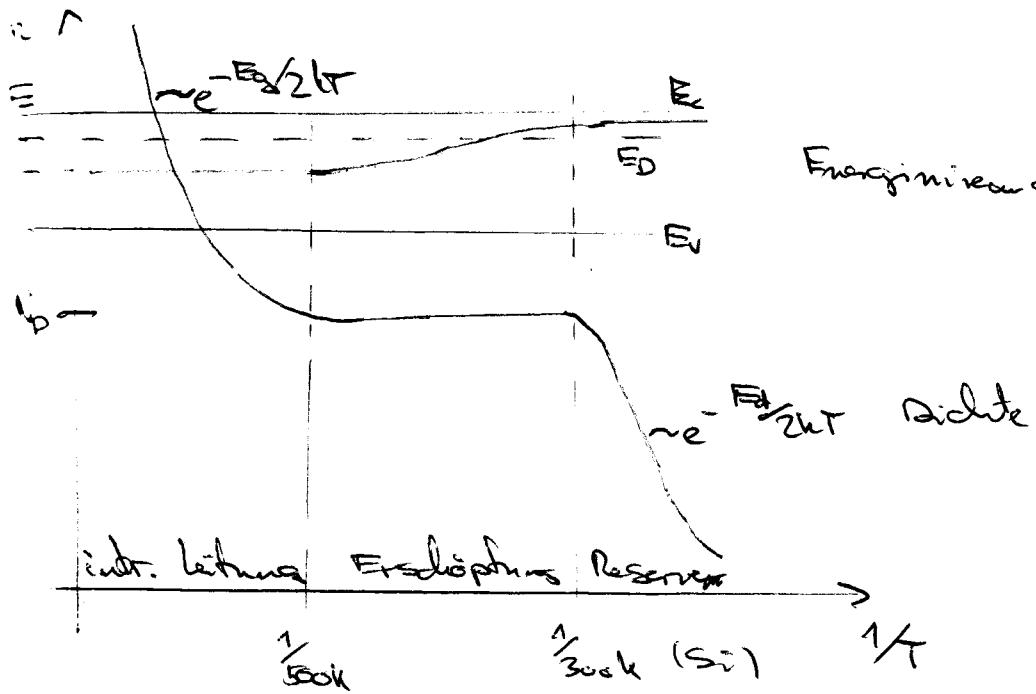
quadr. Gf. für Ladungsträgerkonzentration

$$\rightarrow n = \frac{N_c^{\text{eff}}}{2} e^{-E_D/kT} \left(\sqrt{1 + 4 \frac{N_D}{N_{\text{eff}}} \cdot e^{E_D/kT}} - 1 \right)$$

$$E_D \gg kT \therefore n = \sqrt{N_c^{\text{eff}} \cdot N_D} e^{-E_D/2kT}$$

$$kT \gg E_D \therefore \text{mit } \sqrt{1+x} = 1 + \frac{x}{2}$$

$$n = N_D \quad (\text{s.o.})$$



Normale Funktion im Erstöpfungsbestand

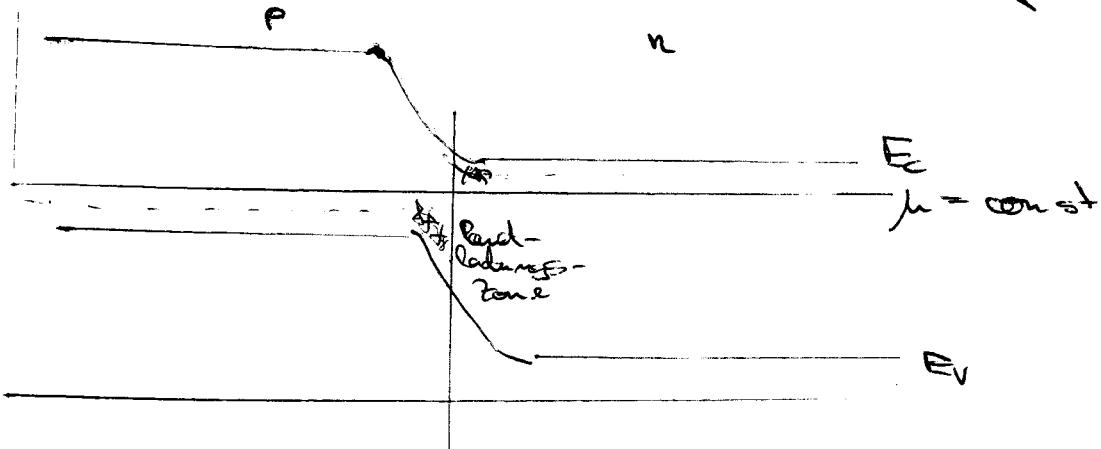
- $P = n$ - Übergang -

p-HL

n-HL

e^-
 e^-
 in Kontakt Diffusions-
 Strom
 Generationsstrom

Im Gleichgewicht: Diffusionsstrom = Generationsstrom



Verbindung
 (bessere
 Lüften
 siehe
 Folie)

$$\nabla^2 \phi(x) = -\frac{e(x)}{\epsilon - \epsilon_0} \quad ; \quad \nabla E = \frac{e(x)}{\epsilon \epsilon_0}$$

$$E \rightarrow E - e \phi(x)$$

$$n(x) = N_c^{\text{eff}} e^{-(E_c - e \phi(x) - E_F) / kT}$$

$$p(x) = N_v^{\text{eff}} e^{-(E_F - (E_v - e \phi(x))) / kT}$$

$$n(x) \cdot p(x) = \dots = N_c^{\text{eff}} \cdot N_v^{\text{eff}} \cdot e^{-E_{\text{gap}} / kT}$$

$$\begin{aligned} n(\infty) \cdot p(-\infty) &= N_c^{\text{eff}} \cdot e^{-(E_c - e \phi(\infty) - E_F) / kT} \\ &\cdot N_v^{\text{eff}} e^{-(E_F - (E_v - e \phi(-\infty))) / kT} \\ &= e^{e(\phi(\infty) - \phi(-\infty)) / kT} \end{aligned}$$

$$e(\phi(\infty) - \phi(-\infty)) = e \Delta \phi = E_{\text{gap}} + kT \cdot \ln \frac{n_A - n_D}{N_c^{\text{eff}} \cdot N_v^{\text{eff}}}$$

$$n = N_c e^{-x} ; x > 0 \quad n < N_c$$

Erschöpfung

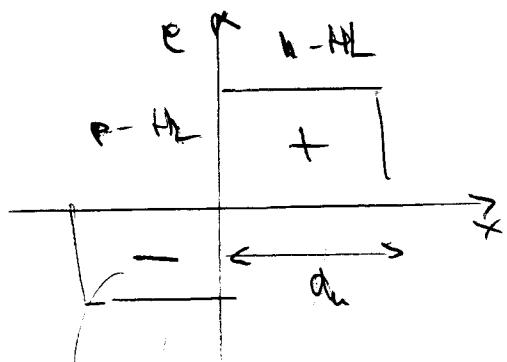
$$e \Delta \phi \approx E_{\text{gap}}$$

$$e \Delta \phi = E_{\text{gap}} - kT \ln \frac{N_c^{\text{eff}} \cdot N_v^{\text{eff}}}{n_D \cdot n_A}$$

Berechnung von
Δφ: Potentialprung

Schottky-Näherung

Setze $\epsilon(x)$:



gleiche Flächen

Ladungsträgerneutralität

$$n_A^- \cdot d_\phi = n_D^+ \cdot d_\phi$$

$$\frac{\epsilon_0}{\epsilon} \frac{d^2 \phi(x)}{dx^2} = n_A^- - n_D^+ + N_c^{\text{eff}} e^{-(E_c - e \phi(x) - E_F) / kT} - N_v^{\text{eff}} e^{-(E_F - (E_v - e \phi(x))) / kT}$$

Rechtecknäherung hilft beim
Lösen dieser Dgl.

Nedderkennung nach Schottky:

$$\rho(x) = \begin{cases} 0 & x < -d_p \\ -n_A e & -d_p \leq x \leq 0 \\ n_D e & 0 \leq x \leq d_n \\ 0 & x > d_n \end{cases}$$

Rammbildungszone besteht aus negativ geladenen Abzeptoren und positiv geladenen Donatoren mit asymptotischen Grenzen

$$\phi(x) = \begin{cases} \phi(-\infty) & x < -d_p \\ \phi(-\infty) + \frac{1}{2} n_A e (x + d_p)^2 \cdot \frac{1}{\epsilon \epsilon_0} & -d_p \leq x < 0 \\ \phi(\infty) - \frac{n_D e}{2 \epsilon \epsilon_0} (x - d_n)^2 & 0 \leq x \leq d_n \\ \phi(\infty) & x > d_n \end{cases}$$

$$x=0 : \phi(-\infty) - \phi(\infty) = \frac{n_A e}{2 \epsilon \epsilon_0} d_p^2 + \frac{n_D e}{2 \epsilon \epsilon_0} d_n^2 \\ = \frac{e}{2 \epsilon \epsilon_0} (n_A d_p^2 + n_D d_n^2)$$

$$\text{Neutralität } n_A \cdot d_p = n_D \cdot d_n$$

$$\Delta \phi |_{d_p} = \frac{e}{2 \epsilon \epsilon_0} \left(\frac{n_D^2 d_n^2}{n_A} + n_D d_n^2 \right) \\ = \frac{e}{2 \epsilon \epsilon_0} \left(\frac{n_D^2 + n_D \cdot n_A}{n_A} \right) \cdot d_n^2$$

$$d_n = \sqrt{\frac{2 \epsilon \epsilon_0}{e}} \frac{n_A / n_D}{n_D + n_A} \cdot \Delta \phi'$$

$$d_p = \sqrt{\frac{2 \epsilon \epsilon_0}{e}} \frac{n_D / n_A}{n_D + n_A} \cdot \Delta \phi'$$

P-HL

$E_A = E_V$

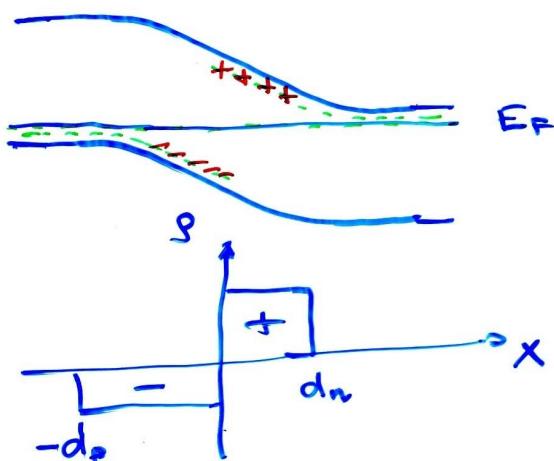
n HL

$E_D \approx n$

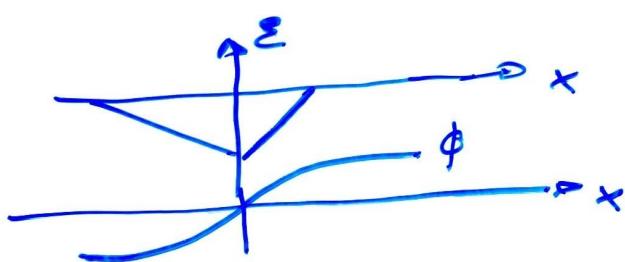
Feldstrom

$P \leftarrow e^- n$

Diffusion



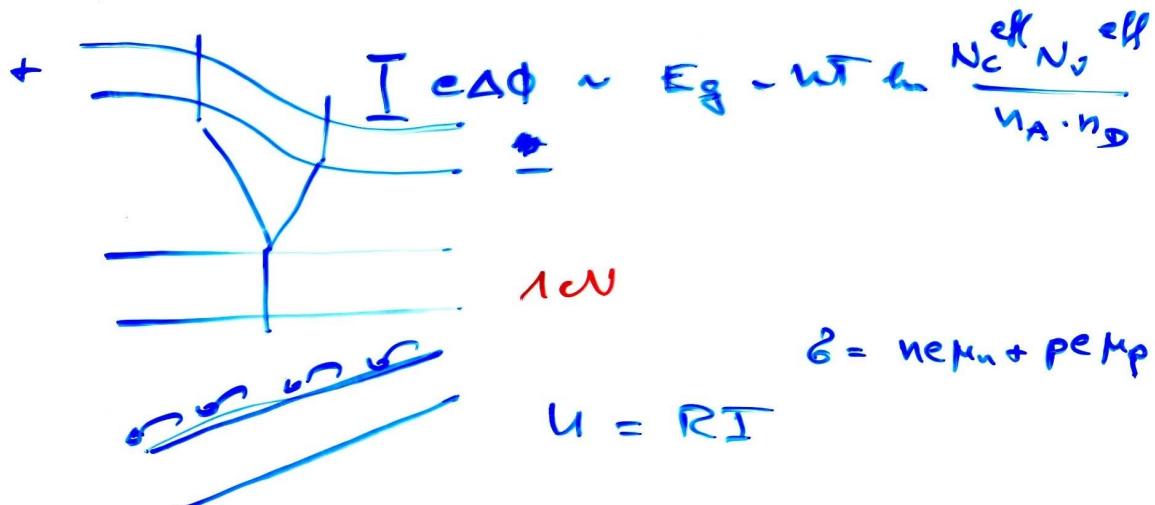
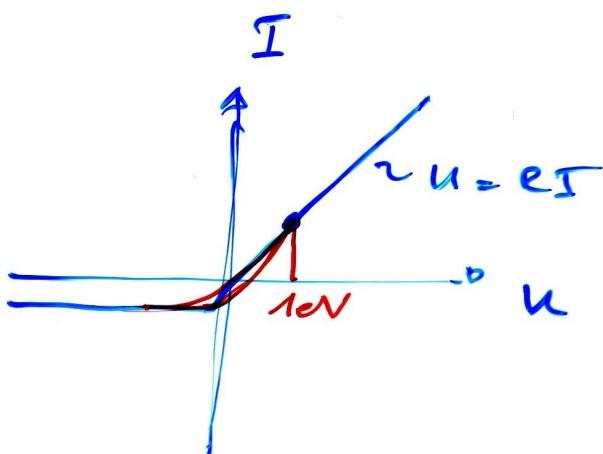
$$n_d d_n = n_A \cdot d_p$$



$$\nabla^2 \phi = -\frac{q}{\epsilon \epsilon_0}$$

$$E = E - e\phi$$

145 -



146 -

Diode unter Spannung

$$U = 0 ; \quad \underbrace{I_{\text{gen}}}_{\text{Feldstrom}} = \underbrace{I_{D:\text{H}}}_{\text{Rekombinationsstrom}}$$

$$I_{D:\text{H}} \propto e^{-e\Delta\phi/kT}$$

$U \neq 0$

$$I_{D:\text{H}} \propto e^{-e(\Delta\phi - U)/kT}$$

$$I_{\text{gen}}(U \neq 0) = I_{\text{gen}}(U = 0)$$

$$I = I_{\text{diff}} - I_{\text{gen}}$$

$$= I_{\text{diff}}(U=0) e^{eU/kT} - I_{\text{gen}} \quad \text{Diodenkenntlinie}$$

$$= I_{\text{gen}}(e^{eU/kT} - 1)$$

147-

$$U > e\Delta\phi \Rightarrow \text{ohmisches Verhalten}$$

$$d_n = \sqrt{\frac{2\epsilon\epsilon_0}{e}} \cdot \frac{A/n_D}{n_D + n_A} \cdot \Delta\phi$$

$$\Delta\phi \rightarrow \Delta\phi - eU$$

d_n wird "kleiner" im Vorwärtsschaltung
bei Polung

d_n "größer" im Sperrichtung

$$\dot{f}_{\text{gen}}^n = -e \frac{n_i^2}{p} \cdot \frac{L_n}{z_n} = -e \frac{N_c e^U N_V e^H c^{-E_{\text{gap}}/kT}}{n_A} \cdot \frac{L_n}{z_n}$$

$$p \cdot n = n_i^2 = N_c e^U N_V e^H c^{-E_{\text{gap}}/kT}$$

148-

$$Q = e \cdot d_n(u) \cdot A \cdot n_D$$

$$C = \frac{dQ}{du} = e \cdot A \cdot n_D \cdot d\left(\frac{d_n(u)}{du}\right)$$

$$d_n = \sqrt{\frac{2\varepsilon\varepsilon_0}{e} \cdot \frac{n_A/n_D}{n_A + n_D}} \cdot \sqrt{\Delta\phi - eu}$$

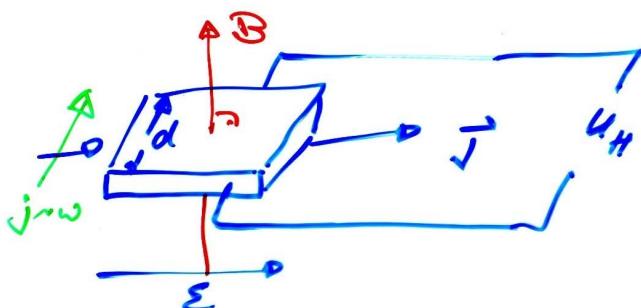
$$C = \frac{A}{2} \cdot \left(\frac{n_A \cdot n_D}{n_A + n_D} \cdot \frac{2\varepsilon\varepsilon_0 e}{\Delta\phi - u} \right)^{1/2}$$

$C(u)$ - Messung $\Rightarrow n_A, n_D$

7.5 Transistoren

149 -

7.6. Hall-Effekt



$$\vec{t} \vec{E} = -e(\vec{\varepsilon} + \vec{v} \times \vec{B})$$

semiklassische Näherung $\vec{\varepsilon} \perp \vec{B}$

$$\text{NR: } (\vec{\varepsilon} \times \vec{B}) \times \vec{B} = -\vec{B} \times (\vec{\varepsilon} \times \vec{B}) = -\vec{\varepsilon} \cdot (\vec{B} \cdot \vec{B}) + \underbrace{\vec{B} \cdot (\vec{B} \cdot \vec{\varepsilon})}_{=0}$$

$$\vec{t} \vec{E} = -e \left(\frac{\vec{B} \times (\vec{\varepsilon} \times \vec{B})}{B^2} + \vec{v} \times \vec{B} \right)$$

$$= -e ((\vec{v} - \vec{\omega}) \times \vec{B}) ; \omega = (\vec{\varepsilon} \times \vec{B}) / B^2$$

150 -

Driftstrom d. Elektronen mit Geschwindigkeit

ω

$$\boxed{\vec{j} = -ne\vec{\omega}}$$

$$\begin{matrix} \omega \perp \vec{\epsilon} \\ \omega \perp \vec{B} \end{matrix}$$

$$\vec{j} = -n \cdot e \cdot \frac{\vec{\epsilon} \times \vec{B}}{B^2}$$

$$\vec{\epsilon} = \frac{1}{ne} \cdot \vec{j} \times \vec{B} = -R_H \vec{j} \times \vec{B}$$

$$R_H = -\frac{1}{ne} \quad \text{Holloeffizienz}$$

$$U_H = \cancel{\frac{q}{4\pi}} \vec{\epsilon} \cdot \vec{d}$$

Bestimmung d. Ladungsdichtenkonzentration n

151 -

$$\begin{aligned} \vec{\epsilon}_x &= s_x \cdot j_x - R_H \cdot j_y \cdot \vec{B} \\ \vec{\epsilon}_y &= R_H j_x \cdot \vec{B} + s_y \cdot j_y \end{aligned} = \underbrace{\begin{pmatrix} s_x - R_H B \\ R_H B & s_y \end{pmatrix}}_{\underline{s}} \cdot \begin{pmatrix} j_x \\ j_y \end{pmatrix}$$

$$\underline{\underline{\epsilon}} = \underline{\underline{s}} \cdot \underline{\underline{j}}$$

152 -

Quantum Hall Effect

$$E = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_e} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m_e} + E_n$$

Teilchen im BOZ:

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m_e} \cdot \frac{(2\pi)^2}{(2L)^2} \cdot n^2$$

Magnetfeld in z-Richtung

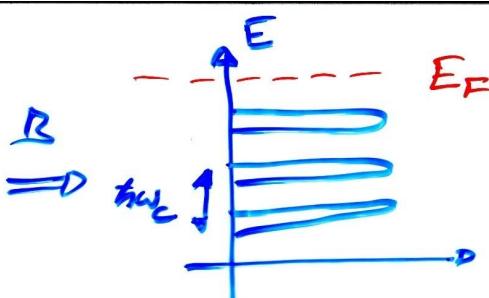
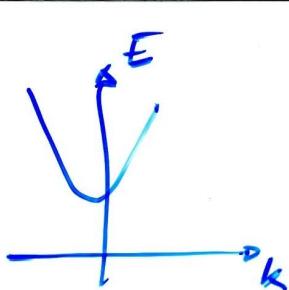
$$\omega_c = -\frac{e \cdot B}{m_e} \quad \text{Zyklonfrequenz}$$



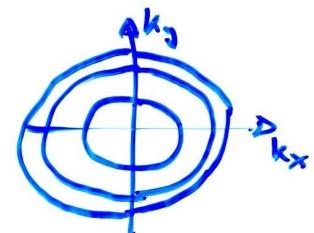
Landau-Niveaus:

$$E = E_n + (m + \frac{1}{2}) \cdot \hbar \omega_c + g \cdot s \cdot \mu_B \cdot B$$

153 -



Landau-Niveaus



Zylinder

Zustandsdichte 2d. - Elektronengas

$$n = 2 \cdot \frac{1}{(2\pi)^2} \cdot \pi \hbar^2 = 2 \cdot \frac{1}{(2\pi)^2} \cdot \pi \cdot \frac{2m}{\hbar^2} \cdot E$$

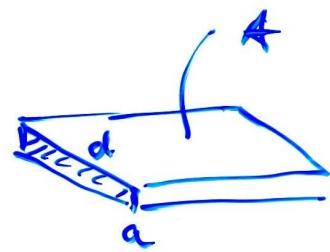
$$D(E) = \frac{dn}{dE} = 2 \cdot \frac{1}{(2\pi)^2} \cdot \frac{2m}{\hbar^2} \cdot E = 2 \cdot \frac{m}{2\pi \hbar^2}$$

$$N_L = D(E) \cdot \hbar \omega_c = \frac{m}{2\pi \hbar^2} \cdot \hbar \cdot \frac{e \cdot B}{m}$$

$$N_L = \frac{e}{h} \cdot B$$

154 -

$$\begin{aligned}
 U_H &= \epsilon_H \cdot d = \frac{1}{ne} \cdot jx \cdot B \cdot d \\
 &= \frac{B \cdot d}{v \cdot N_L / a \cdot c} \cdot \frac{I}{da} \\
 &= \frac{B \cdot I}{v \cdot N_L \cdot e} \\
 &= \frac{h}{e^2} \cdot \frac{1}{v} ; I; v = 1, 2, 3, \dots \\
 R_H &= \frac{U_H}{I} = \frac{h}{e^2} \cdot \frac{1}{v} ; v = 1, 2, 3, \dots
 \end{aligned}$$



8. Dielektrische Eigenwerten

Reaktion des Fu auf elektromagn. Wechselfelder
ist bestimmt $\epsilon(\omega, k)$

ϵ : komplexe, dielektr. Funktion

$\omega \gg \alpha$; $k \rightarrow 0$; $\epsilon(\omega, 0)$ Frequenzabhängige Phänomene

$\omega \rightarrow 0$; statisch; $\epsilon(0, k)$ nicht-lokale Phänomene
(Thomas-Fermi- \rightarrow Abschirmungslänge)

Fouriertransf.:

$$\mathcal{F}T(f \otimes g) = \mathcal{F}T(f) \cdot \mathcal{F}T(g)$$

$$f \otimes g = \int f(t-t') \cdot g(t') \cdot dt'$$

$$P(t) = \epsilon_0 \int_{-\infty}^t \chi(t-t') E(t') dt' \quad \text{Kausalität}$$

$$P(\omega) = \epsilon_0 \chi(\omega) \cdot E(\omega)$$

8.1. Makroskopische Beschreibung

$$\text{rot } E = - \dot{B}$$

$$\text{rot } H = j + \dot{D}$$

$$D = \epsilon_0 \epsilon E = \epsilon_0 E + P ; P = \epsilon_0 \cdot \chi \cdot E$$

$$\epsilon(\omega) = 1 + \chi(\omega)$$

\downarrow Suszeptibilität

$$j = \tilde{\epsilon}(\omega) \cdot E$$

$$\text{ohne ext. Ladungen : } D \cdot D = 0 = g_{\text{ext}}$$

$$E(+) = \int E(\omega) e^{i\omega t} d\omega \quad E(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int E(+) e^{-i\omega t} dt$$

157 -

$$\begin{aligned} \text{rot } H &= \tilde{\epsilon} \cdot E + \epsilon_0 \epsilon(\omega) - i\omega \cdot E \\ &= [\tilde{\epsilon} - i\omega \epsilon_0 \epsilon(\omega)] \cdot E = \tilde{\epsilon}(\omega) \cdot E = \tilde{j} \end{aligned}$$

$\tilde{\epsilon}(\omega) \hat{=} \text{verallgemeinerte Leitfähigkeit}$

$\hat{=} \text{Bild freier Elektronen}$

$$\begin{aligned} \text{rot } H &= -i\omega \epsilon_0 \left[\tilde{\epsilon} \epsilon(\omega) + \frac{i\tilde{\epsilon}(\omega)}{\epsilon_0 \omega} \right] E(\omega) \\ &= -i\omega \epsilon_0 \tilde{\epsilon}(\omega) \cdot E(\omega) = \tilde{D}(\omega) \end{aligned}$$

$\tilde{\epsilon}(\omega) \hat{=} \text{verallgemeinerte Dielektrizitätskonstante}$

$\hat{=} \text{Bild gebundener Elektronen}$

Unterschied zwischen freien und gebundenen Elektronen
verschwindet im el. magnet. Wechselfeldern

158 -

Dispersion für elektromagn. Wellen im Medium

$$\mu_0 \tilde{D} \approx \mu_0 \cdot \text{rot} \vec{H} = \text{rot} \vec{B} = -\text{rot} \vec{E}$$
$$\mu_0 \tilde{D} = \nabla^2 E$$

$$\mu_0 \epsilon_0 \tilde{\epsilon}(\omega) \tilde{E} = \nabla^2 E$$

$$\mu_0 \epsilon_0 \tilde{\epsilon}(\omega) \omega^2 = k^2 \quad ; \quad \mu_0 \epsilon_0 = \frac{1}{c^2}$$

$$\boxed{\tilde{\epsilon}(\omega) \omega^2 = k^2 c^2}$$

ϵ reell. Wellenausbreitung

ϵ reell < 0 ; ω reell \Rightarrow Imaginär: Dämpfung
charakt. Länge $1/|k|$

\Rightarrow Totaleffexion

ϵ komplex, k komplex \Rightarrow Dämpfung

159 -

$\epsilon = \infty$ bei kleinsten Störung \Rightarrow endliche Response

Pole von $\tilde{\epsilon}(\omega)$ sind Eigenschwingungen des
Systems (hier Schwingungen)

$$\epsilon = 0 \quad D \cdot D = 0 = \epsilon \cdot \epsilon_0 \cdot P \cdot E = \frac{\epsilon}{\epsilon - 1} P \cdot P$$
$$E = \epsilon_0 \cdot X \cdot P = \epsilon_0 (\epsilon - 1) \cdot P$$

\Rightarrow 2 Lösungen mit $D \cdot P \neq 0$ $k \cdot P \neq 0$

\Rightarrow longitudinale Eigenschwingungen

160 -

Optik

$$\tilde{n} = n + ik = \sqrt{\epsilon} \quad \text{Brechungsindex}$$

$$\epsilon_r = n^2 + k^2 ; \quad \epsilon_i = 2kn$$

Reflexion bei senkrechtem Einfall

$$R = \frac{(n-1)^2 + k^2}{(n+1)^2 + k^2}$$

$$\epsilon < 0 \Rightarrow n \equiv 0 \Rightarrow R \equiv 1$$

Totalreflexion ; expon. Dämpfung: e^{-kx} im Medium



8.2. Polarisationsbeiträge

$$\epsilon = 1 + \chi ; \quad P = \epsilon_0 \cdot \chi E \quad (\text{linear response})$$

a) Orientierungspolarisation

= Ausrichtung permanenter Dipole im Feld $\sim 10^4 \text{ Hz}$

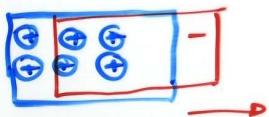
b) Induzierung von Dipolen

Ionen: ω_{TO} ($\omega \ll \omega_{TO}$) $\sim 10^{13} \text{ Hz}$ 50 meV infrarot

gebundene Elektronen:

ω	$\sim 10^{16} \text{ Hz}$	
	$\sim 2-6 \text{ eV}$	sichtbar - UV

c) freie Elektronen:

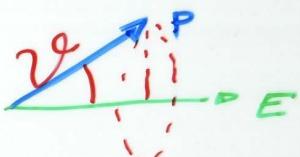


Kollektive longitudinale Schwingung d. Elektronengases
Plasmenschwingung ω_p Plasmon

a) Orientierungspolarisation

$$\underline{P} = n \langle \underline{p} \rangle = n p \langle \cos \vartheta \rangle$$

Polarisation \underline{p} - Einzeldipolmoment



$$\text{Energie } W = - \underline{p} \cdot \underline{E} = - p \cdot E \cdot \cos \vartheta$$

$\leftarrow E \parallel p$ minimale Energie

$$\langle W \rangle = \frac{\int W e^{-W/kT} dW}{\int e^{-W/kT} dW}$$

$$\langle \cos \vartheta \rangle = \frac{\int_{-1}^1 \cos \vartheta e^{-pE \cos \vartheta / kT} d \cos \vartheta}{\int_{-1}^1 e^{-pE \cos \vartheta / kT} d \cos \vartheta} \dots$$

163 -

$$\langle \cos \vartheta \rangle = \operatorname{ctg} x - \frac{1}{x} ; \quad x = \frac{p \cdot E}{kT} \quad \Theta \frac{d}{p = q \cdot d}$$

$$\text{typisch: } x \ll 1 \quad \frac{e \cdot A}{2} \cdot \frac{V}{cm} \sim 10^{-8} \text{ eV}$$

$$\operatorname{ctg} x \approx \frac{1}{x} + \frac{x}{3} - \frac{x^3}{45} \dots$$

$$P = n \cdot p \cdot \langle \cos \vartheta \rangle = \frac{n p^2 \cdot E}{3kT \epsilon_0} = \epsilon_0 \cdot \chi \cdot E$$

$$\chi = \frac{n p^2}{3kT \epsilon_0} = \frac{C}{T} \quad \begin{array}{l} \text{statische Polarisation} \\ \text{Curie Gesetz} \end{array}$$

$$\frac{dP}{dt} = - \frac{P}{\tau} \quad \begin{array}{l} \text{Zerfall d. Polarisation} \\ \text{nach abziehen d. Feldes } E \end{array}$$

$$\tau \sim 10^{-9} - 10^{-11} \text{ s}$$

$$\chi = \chi(T)$$

164 -

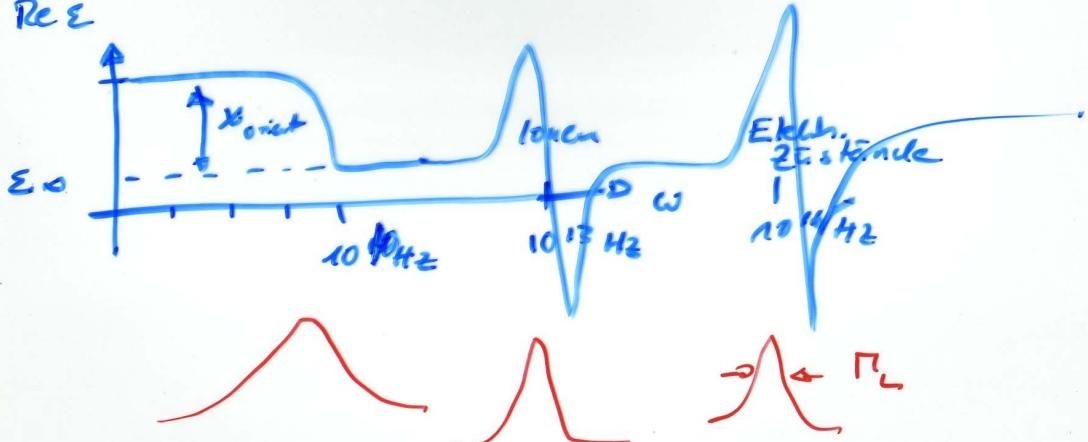
$$\epsilon(0) = \epsilon(\omega=0) = 1 + \chi = 1 + \frac{npc}{3kT\epsilon_0}$$

$$\frac{dP}{dt} = -\frac{P}{\tau} + \frac{\epsilon_0 n \epsilon_0 \cdot E_0 e^{i\omega t}}{\tau}$$

$$P(\omega) = \epsilon_0 \chi(\omega) E_0 e^{i\omega t}$$

$$\chi(\omega) = \epsilon - 1 = \frac{\chi_0(1-i\omega\tau)}{1+(\omega\tau)^2}$$

Re ϵ



165 -

8. Dielektr. Eigenschaften

8.2 Beiträge zur Polarisierung

a) Orientierungs polarisation $\chi \approx \frac{C}{T}$ Curie Gesetz

b) Induzierte Polarisation

Der harmonische Oszillator:

$$m\ddot{x} + kx + Cx = qE$$

$$\ddot{x} + \frac{\dot{x}}{\tau} + \omega_0^2 x = \frac{q}{m} \cdot E : \tau = \frac{m}{k}, \omega_0^2 = \frac{C}{m}$$

$$E = E_0 e^{i\omega t}$$

$$x = x(\omega) e^{i\omega t}$$

$$P(\omega) = n \overset{6}{q} \cdot x(\omega) = \frac{n \cdot q^2 / m}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\omega/\tau} \cdot E_0$$

$$= \epsilon_0 \cdot n \cdot \alpha(\omega) \cdot E_0 \quad ; \alpha(\omega) \text{ Polarisierbarkeit}$$

166 -

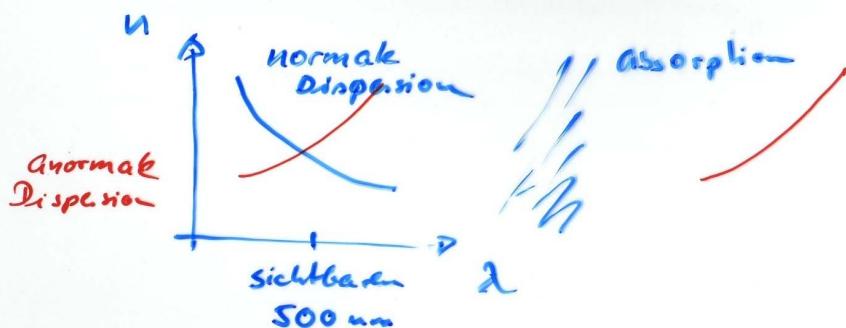
$$\chi = n \cdot \alpha$$

$$\Sigma(\omega) = 1 + \chi(\omega) = 1 + \frac{n^2/m}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\omega/\gamma}$$

$\Sigma(0)$ $\hat{=}$ statischen Dielektrizitätskonstante $= \epsilon_{st}$

$\Sigma(\infty) \hat{=} \epsilon(\omega \rightarrow \infty)$

$$\Sigma(\omega) = \epsilon_r + i\epsilon_i = \epsilon_\infty + \frac{\omega_0^2 (\epsilon_{st} - \epsilon_\infty)}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\omega/\gamma}$$



167 -

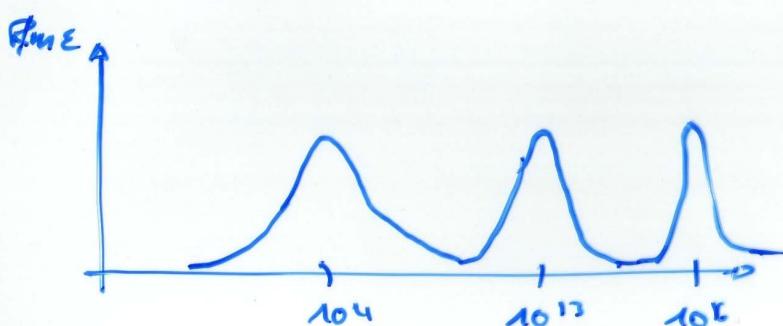
$$P = v \cdot F$$

$$\int P dt = \sigma$$

$$x = x_0 \cdot \cos \omega t$$

$$v = -x_0 \omega \sin \omega t$$

$$F = F_0 \cdot \cos \omega t$$



168 -

c) Beitrag freier Elektronen



Plasmenschwingungen

harmon. Oszillator ohne Rückstellkraft

$$\delta(0) = e \cdot \mu \cdot n = e^2 n \cdot \frac{e}{m}$$

$$P = \epsilon_0 \cdot \chi(\omega) \cdot E_0 = - i \frac{n e^2 / m c^*}{\omega^2 + i \omega / \gamma} \cdot E_0$$

$$D = E + \epsilon_0 \cdot P$$

$$\epsilon = 0 ; D \cdot D = 0$$

$$D \cdot E = - \epsilon_0 \nabla \cdot P$$

169 -

$$\epsilon = 1 + \chi = 1 - \frac{n e^2 / m^* \epsilon_0}{\omega^2 + i \omega (m \delta(0) / e^2 n)^{-1}}$$

$$\omega_p^2 = n e^2 / m^* \epsilon_0$$

$$\epsilon = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i \omega \cancel{\epsilon_0} \omega_p^2 / \delta(0)}$$

$\omega_p^2 \hat{=} \text{Plasmafrequenz}$

großes $\delta(0) \Rightarrow \text{Dämpfung klein}$

$$\boxed{\epsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}}$$

$\epsilon < 0 \Rightarrow \text{Totalreflexion : } \omega < \omega_p$

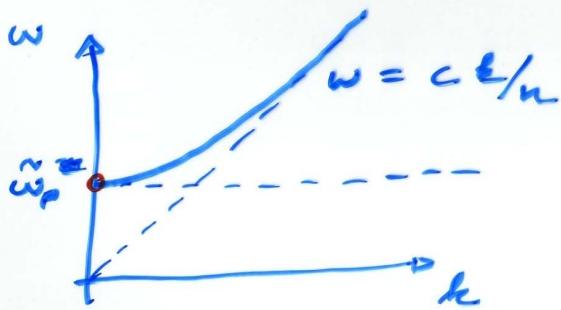
170 -

$$\epsilon(\omega) \cdot \omega^2 = k^2 \cdot c^2$$

$$\epsilon(\omega) = \epsilon(\infty) - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} = \epsilon(\infty) \left(1 - \frac{\tilde{\omega}_p^2}{\omega^2}\right)$$

$$\epsilon(\infty) (\omega^2 - \tilde{\omega}_p^2) = k^2 c^2$$

$$\omega^2 = \tilde{\omega}_p^2 + \frac{k^2 c^2}{\epsilon(\infty)} = \tilde{\omega}_p^2 + \frac{k^2 c^2}{n(\infty)^2}$$



Transversale
elektromagn. Wellen
im Metall
(frei Elektronen)

$$\epsilon = 0$$

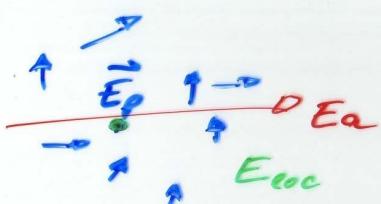
\Rightarrow longitudinale Wellen : ω_{pl} Plasmonen

171 -

3. Korrekturen

a) lokales elektrisches Feld

$$\text{im FK: } \underline{E}_{loc} = \underline{E}_a + \underline{E}_{pec}$$



$$\text{für kritisches Filter: } \underline{E}_{loc} = \underline{E}_a + \frac{1}{3\varepsilon_0} \underline{P}$$

$$\underline{P} = \varepsilon_0 n \cdot \alpha \underline{E}_{loc}$$

$$\chi = \frac{\underline{P}}{\varepsilon_0 \underline{E}_a} = \frac{\varepsilon_0 n \alpha \cdot \left(\underline{E}_a + \frac{1}{3\varepsilon_0} \underline{P}\right)}{\varepsilon_0 \underline{E}_a}$$

$$\chi = \frac{n \alpha}{1 - \frac{n \alpha}{3}}$$

172 -

$$\frac{\epsilon - 1}{\epsilon + 2} = \frac{x}{x+3} = \frac{n_{\text{eff}}}{3}$$

Claustius-Mosotti

b) Wechselwirkung Photon mit Phonon
 \Rightarrow Phonon-Polariton

$$c^2 k^2 E = \omega^2 (\epsilon + \frac{P}{\epsilon_0}) \quad \text{Wellengleichung}$$

$$-\omega^2 P + \omega_T^{-2} P = \frac{Nq \cdot q E}{M} \quad \text{Polarisation}$$

$$\begin{vmatrix} \omega^2 - c^2 k^2 & \frac{\omega^2}{\epsilon_0} \\ \frac{Nq^2}{M} & \omega_T^{-2} - \omega^2 \end{vmatrix} = 0$$

173 -

für $k = 0$

$\omega = 0$ phononartig

$$\omega^2 = \omega_T^{-2} + \frac{Nq^2}{M\epsilon_0} \quad \text{phononartig}$$

$$\epsilon = 1 + x = 1 + \frac{P}{\epsilon_0 E} = 1 + \frac{Nq^2/M\epsilon_0}{\omega_T^{-2} - \omega^2}$$

$$\epsilon(\omega) = \epsilon(\infty) + \frac{Nq^2/M\epsilon_0}{\omega_T^{-2} - \omega^2}$$

$$\epsilon(\omega) = \epsilon(\infty) + \frac{Nq^2/M\epsilon_0}{\omega_T^{-2}}$$

$$\epsilon(\omega) = \epsilon(\infty) + \frac{[\epsilon_0 - \epsilon(\infty)] \omega_T^{-2}}{\omega_T^{-2} - \omega^2} = \frac{-\epsilon(\infty) \omega^2 + \epsilon_0 \omega_T^{-2}}{\omega_T^{-2} - \omega^2}$$

$$\epsilon(\omega) = \epsilon(\infty) \frac{\frac{\epsilon_0}{\epsilon(\infty)} \omega_T^{-2} - \omega^2}{\omega_T^{-2} - \omega^2} = \frac{\omega_0^{-2} - \omega^2}{\omega_T^{-2} - \omega^2}$$

174 -

ω_L Nullstelle

ω_T Pol

$$\frac{\epsilon(0)}{\epsilon(\infty)} = \frac{\omega_L^2}{\omega_T^2}$$

Hydrogen - Sachs - Teller Beziehung

$$\text{NaCl: } \left(\frac{\omega_L}{\omega_T}\right)^2 = 1.44 \pm 0.05$$

GaAs

1.07 ± 0.02

$$\frac{\epsilon(0)}{\epsilon(\infty)} = 1.45 \pm 0.03$$

1.08

c) Interbandübergänge

= vertikale Übergänge $E \uparrow$

8. Supraleitung

Die **Supraleitung**, bei der Widerstand unterhalb einer *Sprungtemperatur* T_C verschwindet, ist ein Phänomen, das man bei vielen Elementen und Verbindungen findet. Der supraleitende Zustand ist thermodynamisch eine eigene Phase, da sich z. B. die spezifische Wärme beim Übergang aus dem normalleitenden Zustand sprunghaft ändert.

Verschwindender Widerstand bedeutet, die Elektronen bewegen sich ohne Reibung: $m\dot{v} = -e\underline{E}$

Mit der Stromdichte $\underline{j}_s = -e n_s \underline{v}$ folgt die

1. London-Gleichung

$$\frac{\partial}{\partial t} \underline{j}_s = \frac{n_s e^2}{m} \underline{E}$$

j_s und n_s sind die supraleitenden Strom- bzw. Ladungsträgerdichten. Mit

der Maxwell-Gleichung $\nabla \times \underline{E} = -\dot{\underline{B}}$ erhält man $\frac{\partial}{\partial t} (\frac{m}{n_s e^2} \nabla \times \underline{j}_s + \underline{B}) = 0$.

Die supraleitende Phase genügt der strengeren

2. London-Gleichung

$$\nabla \times \underline{j}_s = -\frac{n_s e^2}{m} \underline{B}$$

Mit der Maxwell-Gleichung $\nabla \times \underline{B} = \mu_0 \underline{j}_s$ erhält man $\Delta \underline{B} = \underline{B}/\Lambda^2$ bzw. $\Delta \underline{j}_s = \underline{j}_s/\Lambda^2$, die den exponentiellen Abfall des Magnetfelds und der induzierten diamagnetischen Abschirmströme im Supraleiter mit der *London-Eindringtiefe* $\Lambda = \sqrt{m/\mu_0 n_s e^2}$ beschreibt ($\Lambda < 260 \text{ \AA}$).

Die Supraleitung ist ein quantenmechanisches Vielteilchenphänomen, das 1957 von Bardeen, Cooper und Schrieffer in der *BCS-Theorie* erklärt wurde.

1. Attraktive Elektron-Elektron-Wechselwirkung: Fliegt ein Elektron durch einen Kristall, so werden die Ionen zur Bahn hingezogen. Die Ionen benötigen etwa die Zeit $2\pi/\omega_D \approx 10^{-13} \text{ s}$ mit der Debyekreisfrequenz $\hbar\omega_D = k_B\Theta_D$ (siehe [Kap. 3.2](#)). Mit der *Fermigeschwindigkeit* $v_F \approx 10^6 \text{ m/s}$ ergibt sich eine positive Ladungsanhäufung $2\pi v_F/\omega_D \approx 1000 \text{ \AA}$ hinter dem Elektron. Dies führt zur Anziehung eines weiteren Elektrons. Die Coulombabstößung zwischen den Elektronen ist im Metall über wenige Atomabstände abgeschirmt.

2. Cooper-Paare: Die phononenvermittelte Elektron-Elektron-Streuung kann aufgrund des Pauliprinzips nur wirken, wenn beide Elektronen vorher und nachher auf einer Kugelschale im \underline{k} -Raum mit $E_F \leq E = \hbar^2 k^2 / 2m \leq E_F + \hbar\omega_D$ sind. Die Elektronen eines Cooper-Paares haben entgegengesetztes \underline{k} und entgegengesetzten Spin und bilden daher ein Quasiteilchen mit Spin 0. Die Energie des Paarzustands $\epsilon \approx -2\hbar\omega_D \exp \frac{-2}{V_0 \tilde{D}(E_F)} < 0$, mit attraktiven Potential V_0 und der Zustandsdichte $\tilde{D}(E)$, ist stets niedriger als die des Zustands zweier unkorrelierter Teilchen.

3. BCS-Grundzustand berücksichtigt, daß die Einelektronenzustände beim Vorhandensein vieler Cooper-Paare nicht doppelt besetzt werden. Die Besetzungswahrscheinlichkeit ist gegenüber dem Einteilchengrundzustand um $\pm\Delta$ aufgeweicht, auch bei $T = 0$. Um ein Cooperpaar aufzubrechen, benötigt man mindestens die Energie 2Δ . Die Bandlücke des Zweiteilchenspektrums kann man durch Infrarotreflexion bestimmen. Die Energie $\Delta \approx 2\hbar\omega_D \exp \frac{-1}{V_0 \tilde{D}(E_F)}$ hängt in der BCS-Theorie mit der Sprungtemperatur zusammen: $\Delta = 1.764 k_B T_C$. Die BCS-Theorie erklärt das Temperaturverhalten der Bandlücke, sowie die Massenabhängigkeit wegen $\omega_D \propto \sqrt{1/M}$. Die Energie des BCS-Grundzustands ist um $-\frac{1}{2} \tilde{D}(E_F) \Delta^2$ niedriger als die des normalleitenden Zustands (mittlerer Energiegewinn $\Delta/2$ für $\tilde{D}(E_F) \Delta$ Elektronenpaare). Übersteigt die magnetische Feldenergie $\frac{1}{2} \mu_0 H^2$ den Energiegewinn, so bricht die Supraleitung zusammen. Die kritische Feldstärke ist $H_C = \sqrt{\tilde{D}(E_F)/2\mu_0 \Delta}$ und führt zu einer kritischen Stromdichte $j_C = H_C/\Lambda$. Typische Werte: $H_C = 1 \dots 100 \text{ A/m}$, $B_C = \mu_0 H_C = 0.01 \dots 1 \text{ T}$, $j_C = 10^7 \text{ A/cm}^2$.

