

Kann man sagen wiso/ob die Halbzahligkeit des Spins das Pauli-Prinzip bedingt?

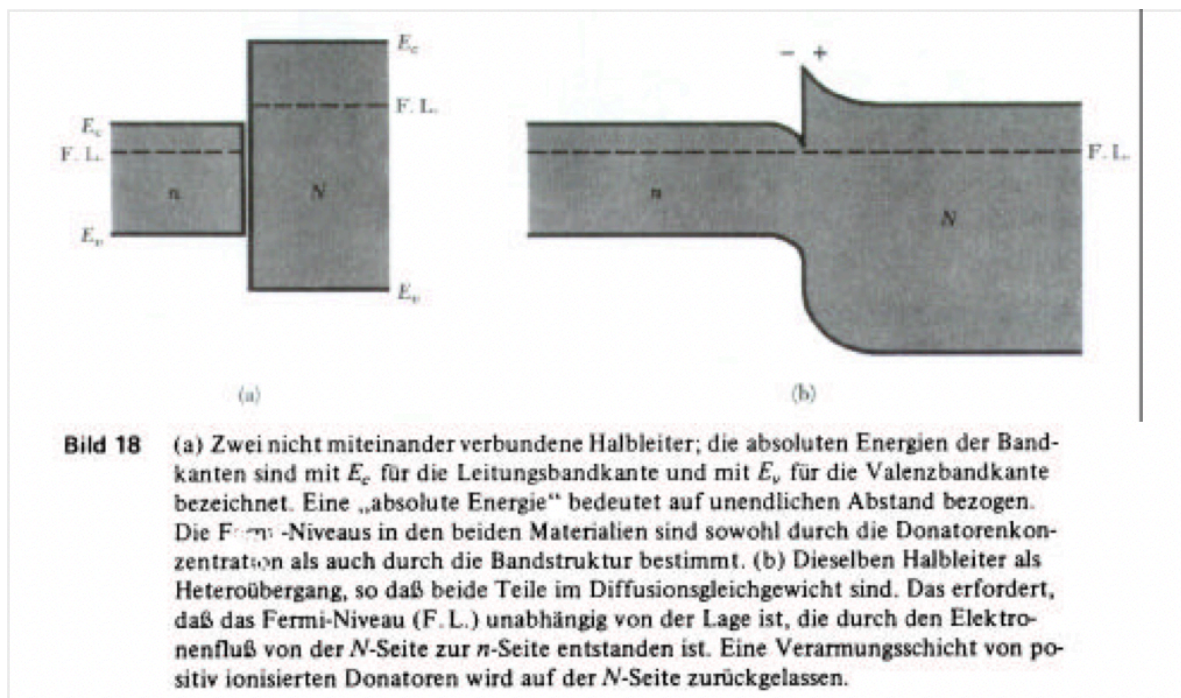
Die mathematische Beschreibung des Wasserstoff läßt sich exakt lösen. Bei zwei Elektronen muß jedoch gewährleistet werden, daß nicht beide in all ihren Quantenzahlen übereinstimmen können.

Dies erreicht man dadurch, daß die Wellenfunktion, die beide Elektronen beschreibt in diesem Fall automatisch Null wird.

Wieso gleichen sich die Fermi-niveaus bei Kontakt verschiedener Metalle und Halbleiter an?

Die beiden Fermi-Niveaus, jedes durch ihres Dotierung bestimmt, müssen übereinstimmen, wenn der Nettoelektronentransport ohne äußere Spannung null sein soll. Weit entfernt von der Grenzfläche müssen die beiden Halbleiter in der Zusammensetzung elektrisch neutral sein.

Als praktisches Beispiel betrachten wir zwei n -Halbleiter mit einer großen Verschiebung zwischen den beiden Leitungsbändern, wie das in Bild 18a für ein Halbleiterpaar mit normaler Bandverschiebung skizziert ist. Das n -Material mit der energetisch höheren Leitungsbandkante wird mit großen Buchstaben als N -leitend bezeichnet, und der dargestellte Übergang wird als n-N Übergang bezeichnet. Die Elektronentransporteigenschaften über den Übergang sind denen über Schottky-Barrieren ähnlich.



Anharmonische Effekte beschreiben reale Verhältnisse, bei denen die harmonische Debye-Näherung versagt:

- thermische Ausdehnung
- temperaturabhängigkeit elastischer Konstanten
- der (geringfügige) Anstieg der spez. Wärme für  $T > \theta$
- endliche Wärmeleitfähigkeit.

Die Effekte treten mathematisch gesehen aus den gleichen Gründen wie in der nichtlinearen Optik auf. Z.B. kann ein Phonon in zwei oder mehr andere Phononen zerfallen ("Phononenzerfall").

Listen Sie kurz prinzipielle Röntgen-Beugungsmethoden auf!

- Laue-Verfahren  
feststehender Einkristall wird mit kontinuierlichem, weißen Spektrum durchstrahlt. Nur für bestimmte Wellenlängen ist die Bragg-Bedingung erfüllt. Es treten bei bestimmten Winkeln konstruktive Interferenzen auf, die zu punktförmigen Reflexen führen.  
Das Verfahren ist in erster Linie dazu geeignet Kristallorientierungen und Kristallsymmetrien zu bestimmen. Kaum zur Strukturbestimmung geeignet.
- Drehkristall-Verfahren  
Einkristall wird in einem monoenergetischen Röntgen/Neutronen-Strahl um eine feste Achse gedreht. Punktförmige konstruktive Interferenzen.
- Debye-Scherrer-Verfahren (Punktdiffraktometrie)

wird zur Untersuchung von Pulvern eingesetzt- Monoenergetischer Strahl. Statistische Orientierung der Kristallite. Ringstruktur auf dem Film.

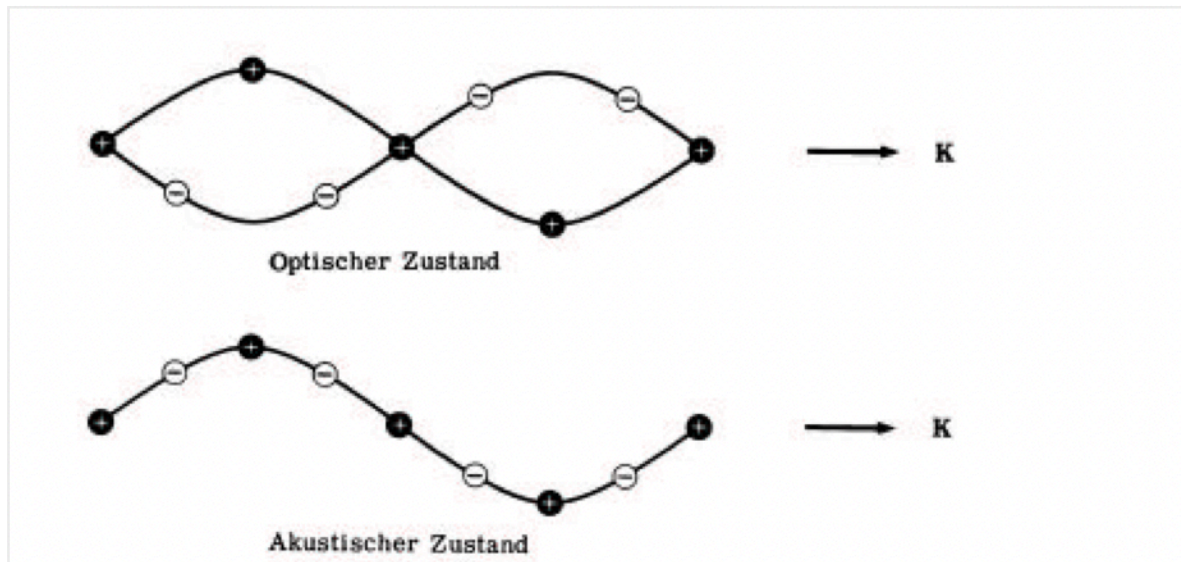
Wird eingesetzt, um die Veränderung der Gitterkonstanten mit der Temperatur oder Variation der Zusammensetzung einer Legierung zu messen.

- adiabatische (Born-Oppenheimer) Näherung: Das Rumpfpotential kann für die Elektronen näherungsweise als zeitlich konstant angenommen werden, da wegen der sehr viel größeren Masse die Kern- und Rumpfbewegungen als sehr langsam und im Grenzfall als nicht vorhanden angesehen werden können. Die Anregungszustände lassen sich damit vereinfacht in einem statischen Potential berechnen. Wechselwirkungen zwischen den sich bewegendem Atomrümpfen und den Elektronen werden dabei vernachlässigt. Zur Behandlung von Transporterscheinungen der Elektronen im Kristall müssen diese Elektron-Gitter-Wechselwirkungen nachträglich wieder in Form einer Störung eingeführt werden.

Die erste Hundsche Regel ist eine Folge des Pauli-Prinzips und der Coulombabstoßung zwischen den Elektronen (siehe auch Absatz unter "Austauschwechselwirkung"). Wegen des Pauli-Prinzips können nicht zwei Elektronen mit gleichem Spin am selben Ort sein. Elektronen mit parallelen Spins sind deshalb weiter voneinander entfernt. Wegen der Coulomb-Wechselwirkung ist die Energie von Elektronen mit parallelem Spin niedriger.

Im optischen Ast schwingen die Atome gegeneinander, ihr gemeinsamer Schwerpunkt bleibt in Ruhe. Tragen die beiden Atome ungleichnamige Ladungen (wie im Bild), so kann man eine solche Bewegung durch das elektrische Feld einer Lichtwelle anregen; deshalb nennt man diesen Ast den optischen Ast.

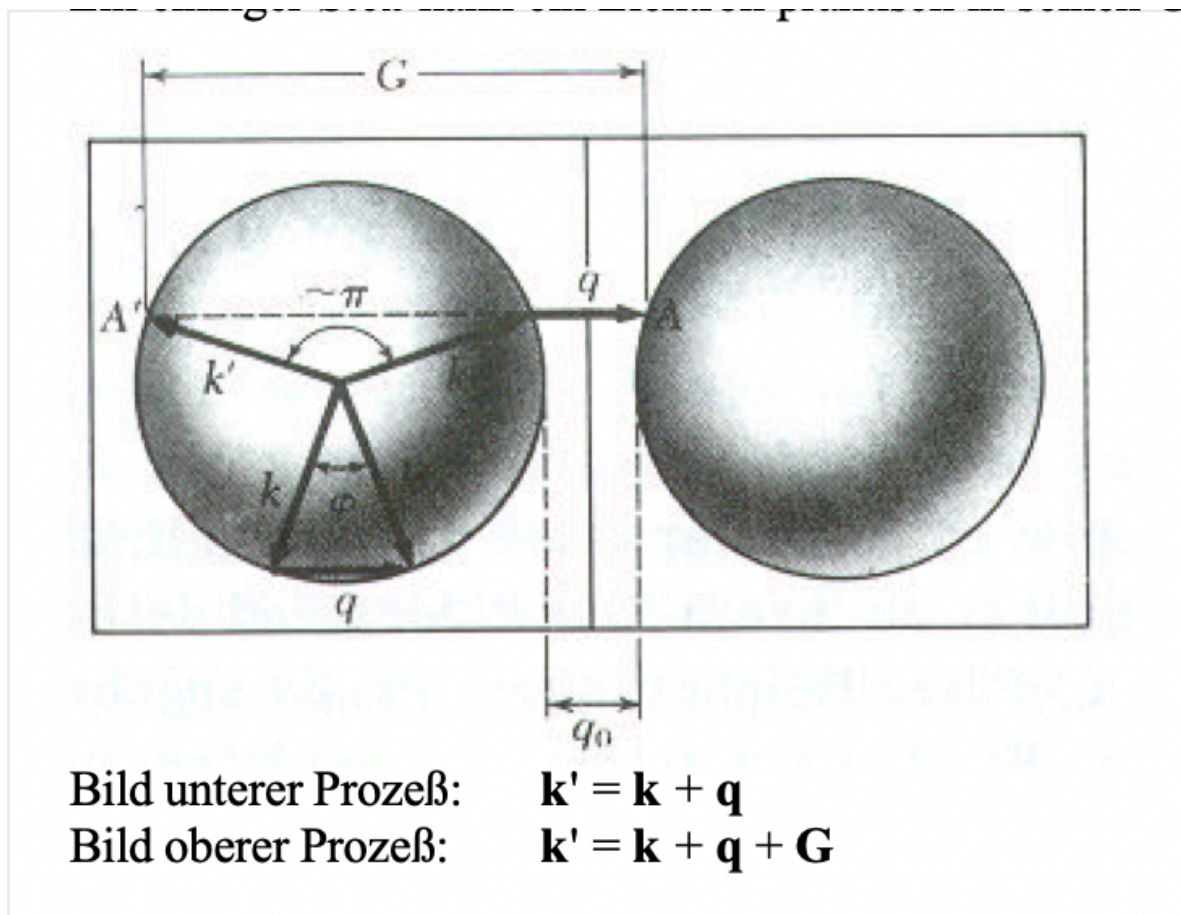
Beim akustischen Ast verschieben sich die Atome wie bei akustischen Schwingungen langer Wellenlänge gemeinsam, daher der Name akustischer Ast.



Wie ermittelt man eine Phononendispersionskurve?  
am besten mit unelast. Neutronenstreuung

Was ist Umklapp-Streuung?

Die Umklapp-Streuung von Elektronen durch Phononen erklärt zum größten Teil den elektrischen Widerstand von Metallen bei tiefen Temperaturen. Das sind Elektron-Phonon-Streuprozesse, bei denen ein reziproker Gittervektor  $G$  beteiligt ist, so daß die Änderung des Elektronenimpulses viel größer ist als in einem normalen Elektron-Phonon-Streuprozess bei tiefen Temperaturen sein kann. Ein einziger Stoß kann ein Elektron praktisch in seinen Grundzustand zurückführen.



Wofür sind die Blochfunktionen / Was sagt das Blochtheorem?

Nach dem Blochschen Theorem besitzt die Lösung der Schrödingergleichung  $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  für ein periodisches Potential  $V(\mathbf{r})=V(\mathbf{r}+\mathbf{T})$  stets die Form der Blochfunktionen:

Im Kristallgitter ist  $\mathbf{T}$  ein fundamentaler Translationsvektor.

Fermikugel:

Volumen im Impulsraum, in dem sich alle Elektronen des Festkörpers befinden. Die Oberfläche der Fermikugel hat die Dimension einer Energie und wird Fermienergie  $E_F$  genannt.

Warum ist die spezifische Wärme der Metallelektronen so gering?

Klassisch würde man bei einer Leitungselektronendichte von ca.  $n=10^{22}\text{cm}^{-3}$  zusätzlich zur Gitterwärme nach dem Gleichverteilungssatz zumindest für höhere Temperaturen einen Elektronenbeitrag von  $c=3nk/2$  erwarten. Experimentell wurde aber keine Abweichung zum Dulong- Petitschen Wert gefunden.

Elektronen können nur dann Energie aufnehmen, wenn sie energetisch in ihrer Nachbarschaft freie Zustände finden. Der Bruchteil dieser Elektronen bezogen

auf ihre Gesamtheit ist aber nur ca.  $1/100$ , wie im folgenden deutlich wird:  
 Die "Aufweichungszone" der Fermi-Verteilung ist von der Größenordnung  $4k_B T$ . Es kann also nur ein Bruchteil von  $4k_B T/E_F$  aller "freien" Elektronen (Dichte  $n$ ) thermische Energie aufnehmen. Die Energie je Elektron ist etwa  $k_B T$ . Die Gesamtenergie dieser Elektronen ist daher von der Größenordnung  $U \approx 4k_B T/E_F \cdot nk_B T$ .

Mit der Fermitemperatur  $T_F = E_F/k_B$ , die üblicherweise von der Größenordnung  $10^5$  ist, folgt für die spezifische Wärme

$$c_V = \partial U / \partial T \approx 8k_B n \cdot T/T_F. \text{ (exakt: } c_V = \partial U / \partial T = \pi^2/2 \cdot k_B n \cdot T/T_F \text{)}$$

Damit ergibt sich wegen des Faktors  $T/T_F$  ein nur verschwindend geringer Beitrag der Leitungselektronen zur spezifischen Wärme.

Bei tiefen Temperaturen, wo der zusätzlich vorhandene Phononenbeitrag die Debysche  $T^3$ -Abhängigkeit zeigt, erwartet man im Experiment

$$c_V = \gamma T + \beta T^3, \text{ mit } \gamma, \beta \text{ konstant}$$

### Wiedemann-Franzsche Gesetz

Die Wärmeleitfähigkeit  $\lambda$  in Metallen ist direkt proportional der elektrischen Leitfähigkeit  $\kappa$ .

Was ist die Molekularfeldnäherung?

lbach:

Bei der Molekularfeld-Näherung wird die Austauschwechselwirkung durch ein mittleres "inneres" Feld ersetzt. Sie wird z.B. für die Spin-WW, bei der Herleitung des Curie-Weiß-Gesetzes verwendet.

Was sind die Ursachen für das magnetische Moment eines freien Atoms?

Ursachen für paramagnetische Beiträge :  $\chi > 0$

- Spin, den die Elektronen besitzen
- Bahndrehimpuls der Elektronen bezüglich ihrer Bewegung um den Kern

Paramagnetische Momente ergeben sich aus

1. ungeraden Zahl von Elektronen, da der Gesamtspin nicht Null sein kann.
2. unausgefüllten Elektronenschalen.
3. einige wenige Verbindungen mit gerader Elektronenanzahl, z.B. molekularem Sauerstoff
4. Metallen

Ursache für diamagnetischen Beitrag:  $\chi < 0$

• Änderung des Bahndrehimpulses, die durch ein äußeres Magnetfeld induziert wird.

Ein diamagnetisches Moment ist immer vorhanden wird aber meist vom

stärkeren Paramagnetismusüberdeckt.

Magnetische Kernmomente führen zum Kernparamagnetismus. Die magnetischen Kernmomente sind Größenordnungsmäßig  $10^{-3}$  mal kleiner als das magnetische Moment des Elektrons.

Die Néel-Temperatur ist die Grenztemperatur des Antiferromagnetismus (analog zur Curie-Temperatur beim Ferromagnetismus).

### **Was sind Spinwellen (Magnonen)?**

Die Energie, die notwendig ist, um den Spin eines bestimmten Elektrons umzuklappen, ist gegeben durch die Austauschwechselwirkung.

### **Hyperfeinaufspaltung**

Als Hyperfeinwechselwirkung bezeichnet man die Wechselwirkung zwischen dem magnetischen Moment des Kerns und dem magnetischen Moment eines Elektrons.

Wenn der Bahndrehimpuls des Elektrons nicht verschwindet, fließt ein Elektronenstrom um den Kern. Wenn der Bahndrehimpuls des Elektrons verschwindet, fließt (zumindest noch) ein Strom von Elektronenspins um den Kern; dieser Strom ist die Ursache der Hyperfeinkontaktwechselwirkung, die vor allem in Festkörpern von Bedeutung ist.

### **Exzitonen**

Reflexions- und Absorptionsspektren zeigen oft schon Strukturen, wenn die Photonenenergie gerade unter der verbotenen Zone liegt, dort würde man erwarten, daß der Kristall durchsichtig ist. Eine solche Struktur entsteht, wenn die Absorption eines Photons mit der Erzeugung eines Exzitons verbunden ist. Ein Elektron und ein Loch können infolge ihrer anziehenden elektrostatischen Wechselwirkung aneinander gebunden sein, gerade so wie ein Elektron an ein Proton gebunden sein kann, und dabei ein neutrales Wasserstoffatom bildet. Das gebundene Elektron-Loch-Paar wird als Exziton bezeichnet. Es kann sich durch ein Kristall bewegen und dabei Anregungsenergie transportieren, aber es transportiert keine Ladung.