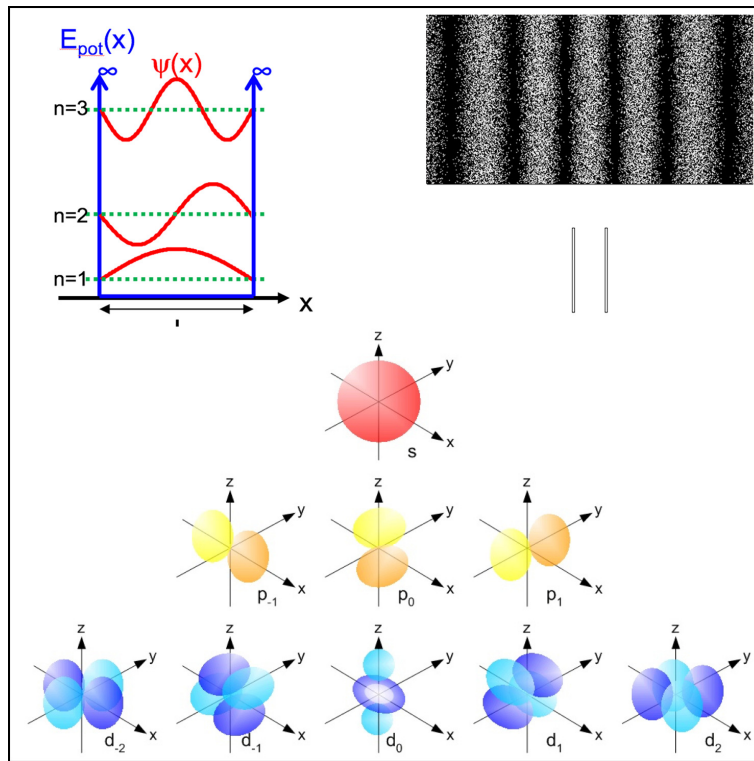


Physik II

Vorlesung gehalten an der ETH Zürich

Prof. Werner Wegscheider

FS 2021



Originalskript erstellt von Prof. C. Degen,
basierend auf seinen Vorlesungen der HS2014/FS2015

24. Februar 2021

Inhaltsverzeichnis

1	Welle-Teilchen Dualismus	1
1.1	Das Photon	1
1.1.1	Energiequantisierung der elektromagnetischen Welle	1
1.1.2	Energie des Photons	2
1.1.3	Impuls des Photons	3
1.2	Materiewellen	7
1.2.1	De Broglie's Hypothese	7
1.2.2	Wahrscheinlichkeitsdichte	8
1.2.3	Erwartungswert und Unschärfe	9
1.2.4	Energie und Impuls einer Teilchenwelle	10
1.2.5	Heisenberg'sche Unschärferelation	10
1.3	Energieniveaus	14
1.3.1	Schrödingergleichung	14
1.3.2	Freie und gebundene Teilchen	15
1.3.3	Das Teilchen im Kasten	15
1.3.4	Energieniveaus	17
2	Atomphysik	19
2.1	Das Atom	19
2.1.1	Bohr'sches Atommodell	19
2.1.2	Energieniveaus von Einelektronenatomen	21
2.1.3	Wellengleichung des Einelektronenatoms	22
2.1.4	Quantenzahlen des Einelektronenatoms	26
2.1.5	Eigendrehimpuls (Spin)	28
2.1.6	Periodensystem	29

2.2	Absorption und Emission von Licht	31
2.2.1	Atomspektren	31
2.2.2	Einstein'sche Koeffizienten	32
2.2.3	Grundprinzip des Lasers	33
2.2.4	Aufbau eines Lasers	35
3	Festkörperphysik	39
3.1	Festkörper	39
3.1.1	Bändermodell	39
3.1.2	Fermienergie	41
3.1.3	Fermi-Dirac Verteilung	43
3.1.4	Leiter, Halbleiter und Isolatoren	45
3.2	Elektronische Leitfähigkeit von Festkörpern	48
3.2.1	Drude-Modell	48
3.2.2	Streuung von Leitungselektronen	49
3.3	Halbleiter	52
3.3.1	Dotierung von Halbleitern	52
3.3.2	Kontaktpotential	54
3.3.3	pn-Halbleiterübergänge	54
3.3.4	Diode	55
3.3.5	Solarzelle, Photodiode und Leuchtdiode	55
3.3.6	Transistor	58
3.4	Supraleiter	61
3.4.1	Grundlegende Beobachtungen zur Supraleitung	61
3.4.2	Mikroskopische Erklärung der Supraleitung (BCS Theorie)	62
3.4.3	Supraleiter 1. und 2. Art	63
3.4.4	Hochtemperatursupraleiter (HTC Supraleiter)	64
A	Symbole	65
B	Erhaltungssätze	67

C Polynome	69
C.1 Hermite'sche Polynome	69
C.2 Laguerre Polynome	69
C.3 Legendre Polynome	70

Danksagung

Besonderer Dank gilt:

- Herrn Prof. C. Degen, auf dessen Vorlesungszyklus Physik I und II dieses Skript beruht.
- Herrn Dr. W. Stumpf, der das Skript in übertragen und die Abbildungen nachbearbeitet hat.

Zum Skript

Dieses „Skript“ ist eigentlich kein Skript, sondern eine Zusammenfassung der Themen zur Vorlesung, wie sie im Unterricht präsentiert werden. Das Skript ist der „rote Faden“ der Vorlesung. *Das Skript ersetzt jedoch kein Lehrbuch!* Der Aufbau des Skripts folgt mehrheitlich dem Lehrbuch von von Tipler/Mosca und Tipler/Llewellyn. Besorgen Sie sich eines der beiden Bücher und lesen Sie es parallel zur Vorlesung. Zu jedem Kapitel im Skript ist das entsprechende Kapitel in den beiden Lehrbüchern angegeben. Ohne Lehrbuch und nur anhand des Skripts wird es schwierig sein, den Stoff zu meistern.

Literaturangaben

Literaturangaben beziehen sich auf die folgenden zwei Lehrbücher. Die beiden Lehrbücher decken den Inhalt von Physik 2 ab. Der „Tipler/Mosca“ lässt sich auch für Physik 1 einsetzen, der „Tipler/Llewellyn“ ist ausführlicher. Die Literaturangaben sind zum einfachen Quervergleich angegeben, verbindlicher Lernstoff sind jedoch das Skript und die Übungen.

*Paul A. Tipler, Gene Mosca: Physik für Wissenschaftler und Ingenieure
Spektrum Akademischer Verlag (6. Deutsche Auflage), 2009, 1636 Seiten.
ISBN: 382741945X*

*Paul A. Tipler, Ralph A. Llewellyn: Moderne Physik
Oldenbourg Wissenschaftsverlag, 2009, 982 Seiten.
ISBN: 978-3-486-58275-8*

Experimenthinweise

Hintergrundinformationen zu den Vorlesungsexperimenten sind auf

<http://experimente.phys.ethz.ch/>

(Tab: Vorlesungsexperimente) zu finden. Die Experimenthinweise in der PDF Version des Skripts sind verlinkt.

Kapitel 1

Welle-Teilchen Dualismus

Die Vorlesung Physik 2 gibt eine Einführung in die wichtigsten Bereiche der Physik des 20. Jahrhunderts, ausgehend von der Quantenphysik. In einem ersten Teil (Kapitel 1.2–1.3) werden wir finden, dass Licht als eine Summe von Teilchen (Photonen) betrachtet werden kann. Umgekehrt werden wir sehen, dass Teilchen auch Welleneigenschaften aufweisen können. Dies führt uns zum wichtigen Konzept der Energieniveaus in Kapitel 1.3, welches in allen restlichen Kapiteln benutzt wird.

In einem zweiten und dritten Kapitel werden wichtige physikalische Systeme und Anwendungen behandelt. Kapitel 2 befasst sich mit Atomphysik. Im Unterkapitel 2.1 wird ein einfaches Atommodell vorgestellt und Unterkapitel 2.2 behandelt Lichtabsorption und Emission. In Kapitel 3 wird auf die Physik von Festkörpern eingegangen. Dabei werden wichtige technologische Anwendungen und Materialien besprochen, wie Laser (2.2.3), Dioden, Transistoren und Supraleiter.

1.1 Das Photon

Literatur: Tipler Kap. 34, Tipler/Llewellyn Kap. 3

1.1.1 Energiequantisierung der elektromagnetischen Welle

In der Vorlesung Physik 1 haben wir Licht als elektromagnetische Welle kennengelernt. Die elektromagnetische Welle ist charakterisiert durch die Frequenz ω , den Wellenvektor \vec{k} , die Phase φ und die Amplitude \vec{E}_0 des elektrischen Feldes:

$$\vec{E}(\vec{x}, t) = \vec{E}_0 e^{i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{x} + \varphi)} \quad (1.1)$$

Wir haben auch gefunden, dass die Intensität der elektromagnetischen Welle gegeben ist durch:

$$I = \frac{1}{2} c \varepsilon_0 \left| \vec{E}_0 \right|^2 \quad (1.2)$$

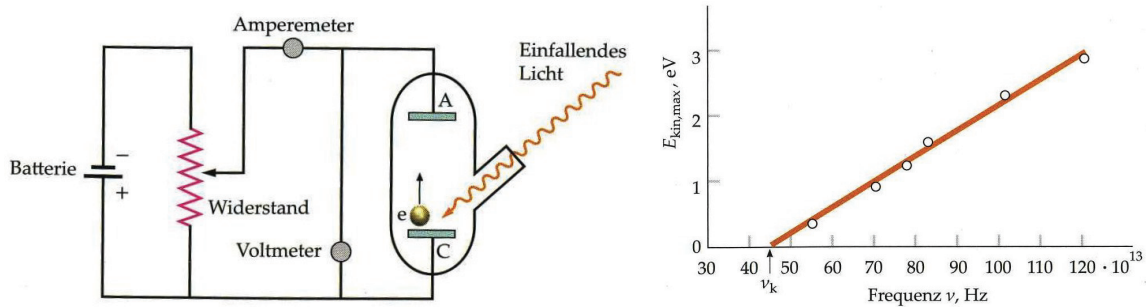


Abbildung 1.1: Der photoelektrische Effekt: Versuchsanordnung (links) und kinetische Energie als Funktion von der Frequenz ν (rechts).

Anhand mehrerer Experimente (das Wichtigste davon ist der Photoeffekt, siehe Kap. 1.1.2) hat man Anfang des 20. Jahrhunderts festgestellt, dass die Amplitude und Intensität einer elektromagnetischen Welle einer weiteren Bedingung unterliegen:

Die Amplitude der elektromagnetischen Welle kann nur diskrete Werte annehmen.

Lichtenergie wird nur in Portionen übertragen. Die Portionen betragen ein Vielfaches der Energiemenge $E = h\nu$, wobei ν die Frequenz der Welle und h eine Konstante ist.

Da Lichtenergie als Vielfaches einer Grundmenge auftritt, kann man diese Grundmenge auch mit einem „Teilchen“ identifizieren. Dieses Teilchen wird Energiequant, Lichtquant oder *Photon* genannt. Wie wir sehen werden, trägt ein Photon nicht nur Energie, sondern auch einen Impuls, und verhält sich also tatsächlich wie ein Teilchen. Durch die Einführung des Photons mit quantisierten Energien gelang es Planck auch die „Ultraviolett Katastrophe“, welche in der Rayleigh-Jeans Beschreibung der Schwarzkörperstrahlung auftritt, zu lösen.

Experiment: Intensitätsverteilung im Spektrum

Experiment: Photonen zähler

1.1.2 Energie des Photons

Der photoelektrische Effekt

Der Photoeffekt ist eines der Experimente, welches demonstriert, dass die Energie des Lichts nur als ein ganzzahliges Vielfaches eines Energiequants auftritt. Im Experiment wird Licht auf eine Metallplatte gestrahlt, und die kinetische Energie der austretenden

Elektronen wird gemessen (siehe Abbildung 1.1 links). Dabei gilt das *Energieerhaltungsprinzip* (siehe Anhang B „Erhaltungssätze“).

Die kinetische Energie der austretenden Elektronen ist:

$$E_{kin} = \frac{1}{2} m_e v_e^2 = h\nu - W_{aus} \quad (1.3)$$

Hier sind m_e die Masse und v_e die Geschwindigkeit des Elektrons, W_{aus} ist die *Austrittsarbeit* (siehe auch Kapitel 3.1.2) und ν die Frequenz der elektromagnetischen Welle. h ist eine Proportionalitätskonstante, welche der Steigung einer Geraden entspricht (siehe Abbildung 1.1 rechts). Die Konstante h ist universell durch den Wert:

$$\boxed{h = 6.626 \cdot 10^{-34} \text{ J s} = 4.136 \cdot 10^{-15} \text{ eV/Hz}} \quad \text{Planck'sche Konstante} \quad (1.4)$$

gegeben und wird die Planck'sche Konstante genannt.

Man sieht, dass die kinetische Energie der Elektronen nur von der Frequenz, aber nicht von der Intensität abhängt! Im mikroskopischen Bild bedeutet das, dass ein Lichtteilchen genau ein Elektron aus dem Metall herausschlagen kann. Man kann Licht deshalb auch als eine Menge von Teilchen mit kinetischer Energie

$$\boxed{E = h\nu} \quad \text{Energie eines Photons mit Frequenz } \nu \quad (1.5)$$

betrachten. Das „Teilchen“ ist das Photon.

Experiment: Äusserer Photoeffekt

Experiment: Planck'sche Konstante

Beispiel: Wie viele Lichtteilchen produziert ein grüner Laserpointer ($\lambda = 532 \text{ nm}$ und $P = 5 \text{ mW}$) pro Sekunde?

$$E_{photon} = h \cdot \nu = h \cdot \frac{c}{\lambda} = \frac{(6.626 \cdot 10^{-34} \text{ J s})(3.00 \cdot 10^8 \text{ m/s})}{532 \cdot 10^{-9} \text{ m}} \approx 3.74 \cdot 10^{-19} \text{ J} \quad (1.6)$$

$$P = \frac{NE_{photon}}{1 \text{ s}} \implies \frac{N}{1 \text{ s}} = \frac{P}{E_{photon}} = \frac{5.00 \cdot 10^{-3} \text{ W}}{3.74 \cdot 10^{-19} \text{ J}} \approx 1.34 \cdot 10^{16} \text{ s}^{-1} \quad (1.7)$$

1.1.3 Impuls des Photons

Als Nächstes werden wir feststellen, dass ein Photon auch einen Impuls trägt. Dazu betrachten wir zwei Experimente.

Strahlungsdruck

Wird ein Lichtstrahl von einem Objekt absorbiert (oder reflektiert), wird dadurch eine Kraft auf das Objekt ausgeübt. Da die Kraft proportional zur exponierten Fläche ist, wird sie auch als *Strahlungsdruck* bezeichnet.

Man findet experimentell, dass der Strahlungsdruck P durch die Intensität I , geteilt durch die Lichtgeschwindigkeit, bestimmt ist:

$$P = \frac{I}{c} \quad (1.8)$$

Dabei ist die Intensität gegeben durch:

$$I = \frac{EN}{A \cdot 1 \text{ s}}, \quad (1.9)$$

Hier ist N die Anzahl Photonen, welche pro Sekunde vom Objekt absorbiert werden. $E = h\nu$ ist die Energie eines Photons und A die absorbierende Fläche. Andererseits ist der Druck P mit dem Impuls p eines Teilchens verknüpft:

$$P = \frac{pN}{A \cdot 1 \text{ s}} \quad (1.10)$$

Daraus folgt für den Impuls des Photons:

$$\boxed{p = \frac{E}{c}} \quad \text{Impuls eines Photons mit Energie } E \quad (1.11)$$

$$\boxed{p = \frac{h}{\lambda}} \quad \text{Impuls eines Photons mit Wellenlänge } \lambda \quad (1.12)$$

Wie ist dieser Impuls zu verstehen? Da Photonen keine Masse besitzen, kann es sich nicht um einen „traditionellen“ Impuls handeln. Um den Impuls des Photons zu erklären, benötigt man die Relativitätstheorie. Diese besagt, dass sich die Gesamtenergie eines Teilchens aus Ruheenergie (Masse) und aus kinetischer Energie zusammensetzt:

$$\boxed{E = \sqrt{p^2 c^2 + (mc^2)^2}} \quad \text{Relativistische Energie eines Teilchens} \quad (1.13)$$

Man kann zeigen, dass sich diese Formel im Grenzfall eines kleinen Impulses ($p \rightarrow 0$) auf die klassische Formel für die kinetische Energie reduziert. Andererseits findet man im Grenzfall kleiner Masse ($m \rightarrow 0$):

$$E = pc \quad (1.14)$$

Daraus folgt unmittelbar, dass $p = h/\lambda$.

Experiment: Radiometerrad1

Experiment: Radiometerrad2

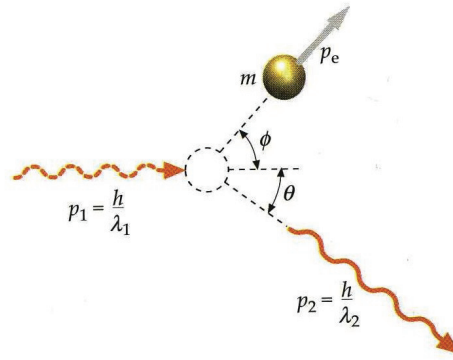


Abbildung 1.2: Compton-Streuung

Compton-Effekt

Der Compton-Effekt beschreibt den Zusammenstoß („Streuung“) eines hochenergetischen Photons mit einem anfänglich ruhenden Elektron. Dadurch erhält das Elektron einen Stoß, und das Photon wird „abgelenkt“, wie in der Abbildung 1.2 dargestellt. Dabei gilt das Prinzip der Energieerhaltung und Impulserhaltung. Wir betrachten nun die Energie und die Richtung des abgelenkten Photons.

Impulserhaltung:

Das Gesetz der Impulserhaltung verlangt, dass der Gesamtimpuls vor und nach dem Stoß gleich gross ist:

$$\vec{p}_1 = \vec{p}_2 + \vec{p}_e \quad (1.15)$$

(Das Elektron ist anfänglich in Ruhe). Daraus folgt für den Impuls des Elektrons:

$$p_e^2 = p_1^2 + p_2^2 - 2p_1p_2 \cos \theta, \quad (1.16)$$

wobei $p \equiv |\vec{p}|$ jeweils den absoluten Betrag bezeichnet.

Energieerhaltung:

Energieerhaltung verlangt, dass die Gesamtenergie vor und nach dem Stoß gleich gross ist:

$$E_1 + E_{e,1} = E_2 + E_{e,2} \quad (1.17)$$

Da sich das Elektron nahe der Lichtgeschwindigkeit bewegt, müssen wir die Formel der relativistischen Energien benutzen. Einsetzen ergibt:

$$p_1c + m_e c^2 = p_2c + \sqrt{p_e^2 c^2 + (m_e c^2)^2} \quad (1.18)$$

Aufgelöst nach dem Impuls des Elektrons findet man:

$$p_e^2 = p_1^2 - 2p_1p_2 + p_2^2 + 2(p_1 - p_2)m_e c \quad (1.19)$$

Compton-Wellenlänge

Kombination von Impuls- und Energieerhaltung ergibt:

$$\frac{p_1 - p_2}{p_1 p_2} = \frac{1}{m_e c} (1 - \cos \theta) \quad (1.20)$$

Dieses Resultat kann man auch als Funktion der Wellenlängen λ_1 , λ_2 oder der Energien E_1 , E_2 der beiden Photonen ausdrücken:

$$\lambda_2 - \lambda_1 = \frac{h}{m_e c} (1 - \cos \theta) = \lambda_{Compton} (1 - \cos \theta) \quad (1.21)$$

$\frac{E_2}{E_1} = \frac{\lambda_1}{\lambda_2} = \frac{1}{1 + E_1/(m_e c^2) \cdot (1 - \cos \theta)}$	Compton-Formel als Funktion der Photonenenergien
---	---

(1.22)

$\lambda_{Compton}$ ist die sogenannte *Compton-Wellenlänge* des Teilchens:

$\lambda_{Compton} = \frac{h}{m_e c}$	Compton-Wellenlänge
---------------------------------------	---------------------

(1.23)

Als Spezialfall findet man beim Winkel $\theta = 90^\circ$:

$$\lambda_2 - \lambda_1 = \lambda_{Compton} \quad (1.24)$$

$$\frac{E_2}{E_1} \stackrel{\theta=90^\circ}{=} \frac{1}{1 + E_1/(m_e c^2)} \quad (1.25)$$

Der Compton-Effekt beweist, dass Photonen einen Impuls haben, genau wie Teilchen. Der Compton-Effekt beweist implizit auch die Formel der relativistischen Energie, und damit die Einsteinformel „ $E = mc^2$ “.

Experiment: Compton-Effekt

1.2 Materiewellen

Literatur: Tipler Kap. 34, Tipler/Llewellyn Kap. 5,6

Wir haben im letzten Kapitel gesehen, dass sich elektromagnetische Wellen wie Teilchen verhalten können, mit kinetischer Energie und Impuls, aber ohne Masse. In diesem Kapitel werden wir finden, dass umgekehrt „normale“ Teilchen mit Masse (wie das Elektron) Welleneigenschaften aufweisen können. Ein charakteristisches Merkmal ist dabei das Auftreten von Interferenz und Beugung. In Tabelle 1.1 sind die Merkmale von Welle und Teilchen zusammengefasst.

Merkmale eines Teilchens	Merkmale einer Welle
Ein Teilchen hat eine eindeutige Energie und einen eindeutigen Impuls. Ein Teilchen ist punktförmig.	Eine Welle zeigt Interferenz und Beugung. Eine Welle ist räumlich ausgedehnt.

Tabelle 1.1: Eigenschaften von Welle und Teilchen

1.2.1 De Broglie's Hypothese

Im Jahr 1924 postulierte Louis de Broglie, dass alle Teilchen eine Wellenlänge und eine Frequenz besitzen und durch eine Wellenfunktion beschrieben werden können. Die beiden Größen hängen dabei nur von der Masse m und der kinetischen Energie E_{kin} des Teilchens ab. Die de Broglie Frequenz ist:

$$\nu = \frac{E_{kin}}{h} \quad \text{De Broglie Frequenz} \quad (1.26)$$

Die de Broglie Wellenlänge ist:

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2mE_{kin}}} \quad \text{De Broglie Wellenlänge} \quad (1.27)$$

Man beachte, dass unsere alte Beziehung zwischen Frequenz und Wellenlänge, $c = \lambda\nu$, für Teilchen nicht mehr gilt! De Broglie hat diese Beziehungen zuerst für Elektronen aufgestellt, sie sind aber allgemein gültig.

Beispiel: Berechnung der Wellenlänge eines Elektrons mit einer kinetischen Energie von 10 keV (NB: Die Einheit Joule lässt sich umformen $\text{J} = \text{V A s} = \text{N m} = \text{kg m}^2 \text{s}^{-2}$).

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2mE_{kin}}} = \frac{6.626 \cdot 10^{-34} \text{ J s}}{\sqrt{2 \cdot (9.11 \cdot 10^{-31} \text{ kg})(10^4 \text{ V} \cdot 1.60 \cdot 10^{-19} \text{ A s})}} \approx 1.23 \cdot 10^{-11} \text{ m} \quad (1.28)$$

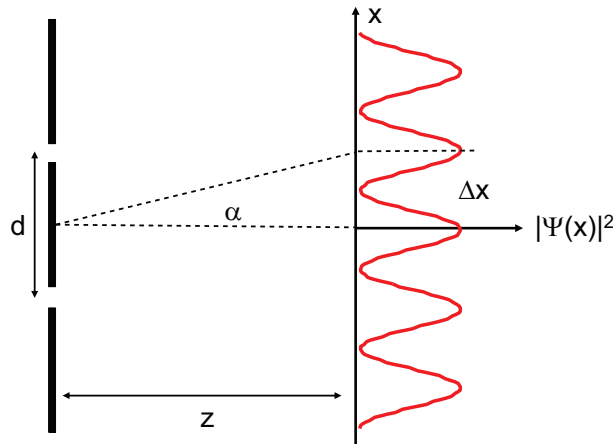


Abbildung 1.3: Interferenz von Teilchen am Doppelspalt

Beispiel: Berechnung der Wellenlänge eines Fussballs mit einer Masse von 430 g und einer Geschwindigkeit von 100 km/h.

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv} = \frac{6.63 \cdot 10^{-34} \text{ J s}}{(0.43 \text{ kg}) \cdot (27.8 \text{ m/s})} \approx 5.55 \cdot 10^{-35} \text{ m} \quad (1.29)$$

1.2.2 Wahrscheinlichkeitsdichte

Interferenz von Teilchen

Um die Welleneigenschaften eines Teilchens zu „beweisen“, kann man ein Interferenz- oder Beugungsexperiment durchführen. Man findet dabei, dass im Fall vieler Teilchen tatsächlich ein Beugungsmuster auftritt (siehe Abb. 1.3)! Damit Beugung stattfindet, muss die Spaltbreite ähnlich gross wie die Wellenlänge sein. Für das Beispiel eines Elektrons mit 10 keV kinetischer Energie ist $\lambda = 1.23 \cdot 10^{-11} \text{ m}$. Das heisst, es sind sehr kleine Spaltbreiten notwendig.

Experiment: Elektronenbeugung

Experiment: Modell - Elektronenbeugung mit Miniaturkugeln

Wahrscheinlichkeitsinterpretation

Wie sieht das Experiment nun aus, wenn man nur ein einzelnes Teilchen betrachtet? In diesem Fall wird das Teilchen auf einer ganz bestimmten Position auf dem Detektor auftreffen, im Widerspruch zum Interferenzmuster.

Der Schlüssel liegt darin, dass man das Experiment viele Male wiederholt, und die Auftreffposition am Detektor notiert. Dabei stellt man fest, dass das Teilchen jedesmal

an einem anderen Ort gemessen wird. Bildet man nun ein Histogramm der Auftreffpositionen, so nähert sich dies dem Betragsquadrat der Wellenfunktion an (vgl. Abb. 1.3). Dies ist die *Wahrscheinlichkeitsinterpretation* der Quantenphysik:

Die Wahrscheinlichkeit $P(x)$, dass das Teilchen am Ort x auftritt, ist durch das Betragsquadrat der Wellenfunktion gegeben.

Dabei ist $P(x)$ die Wahrscheinlichkeitsdichte:

$$\boxed{P(x) = |\psi(x)|^2} \quad \text{Wahrscheinlichkeitsdichte} \quad (1.30)$$

Damit eine Wellenfunktion physikalisch realistisch ist, muss sie normierbar sein. Das heisst, das Teilchen muss mit einer Wahrscheinlichkeit von 1 irgendwo anzutreffen sein:

$$\boxed{\int_{-\infty}^{\infty} P(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1} \quad \begin{array}{l} \text{Normierungsbedingung der} \\ \text{Wahrscheinlichkeitsdichte} \end{array} \quad (1.31)$$

Experiment: Computersimulation „Doppelspalt erzeugt Muster aus Quanten“

1.2.3 Erwartungswert und Unschärfe

Neben der Wahrscheinlichkeitsdichte ist es häufig nützlich, den statistischen Mittelwert und die Streuung einer physikalischen Messgrösse anzugeben. Den Mittelwert nennt man den *Erwartungswert*. Der Erwartungswert $\langle a \rangle$ einer allgemeinen Messgrösse a ist:

$$\boxed{\langle a \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \cdot a(x) \cdot \psi(x) dx} \quad \begin{array}{l} \text{Erwartungswert für eine} \\ \text{allgemeine Messgrösse } a \end{array} \quad (1.32)$$

Hier ist $\psi^*(x)$ die komplex konjugierte Funktion zu $\psi(x)$ und $P(x)$ die ortsabhängige Wahrscheinlichkeit. Der Erwartungswert $\langle x \rangle$ der Position x ist:

$$\boxed{\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \cdot x \cdot \psi(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} x |\psi(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} x P(x) dx} \quad \begin{array}{l} \text{Erwartungswert} \\ \text{der Position } x \end{array} \quad (1.33)$$

Die Streuung der Messgrösse ist durch die Standardabweichung gegeben, und wird *Unschärfe* oder *Unschärfe* des Erwartungswertes genannt. Die Unschärfe der Position x ist:

$$\boxed{\sigma_x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} = \sqrt{\int_{-\infty}^{\infty} x^2 P(x) dx - \left(\int_{-\infty}^{\infty} x P(x) dx \right)^2}} \quad \begin{array}{l} \text{Unschärfe der} \\ \text{Position } x \end{array} \quad (1.34)$$

1.2.4 Energie und Impuls einer Teilchenwelle

Das Konzept von Wahrscheinlichkeitsdichte, Erwartungswert und Unschärfe lässt sich auf beliebige, physikalisch messbare Grössen erweitern. Die beiden wichtigsten Grössen werden im Folgenden die Energie und der Impuls einer Teilchenwelle sein. (Eine weitere Grösse wäre der Drehimpuls). Dazu müssen wir herausfinden, wie man die Energie und den Impuls einer Teilchenwelle $\psi(x, t)$ bestimmt.

Wir betrachten dazu ein Photon mit der Wellenfunktion $\psi(x, t) = \psi_0 e^{i(kx - \omega t + \varphi)}$, also einer ebenen Welle. (Hinweis: Wir haben hier das Vorzeichen zwischen k und ω im Exponenten im Vergleich zu Physik 1 vertauscht, und die in der Literatur übliche Notation benutzt. Die beiden Schreibweisen haben jedoch die gleiche Bedeutung). Die Energie dieser Welle ist $E = h\nu = \hbar\omega$ und der Impuls ist $p = h/\lambda = \hbar k$. Andererseits findet man, dass:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = E\psi(x, t) \quad \text{und} \quad (1.35)$$

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi(x, t) = p\psi(x, t). \quad (1.36)$$

Das heisst, die Energie und der Impuls lassen sich durch Ableitung nach der Zeit t resp. nach dem Ort x bestimmen.

Beispiel: Erwartungswert des Impulses einer ebenen Teilchenwelle

Als Beispiel berechnen wir den Erwartungswert des Impulses für eine ebene Welle mit $\psi(x, t) = \psi_0 e^{i(kx - \omega t + \varphi)}$ zu einem fixen Zeitpunkt t :

$$\begin{aligned} \langle p \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \cdot p \cdot \psi(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^* e^{-i(kx - \omega t + \varphi)} \cdot \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \cdot \psi_0 e^{i(kx - \omega t + \varphi)} dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \cdot \psi(x) \cdot (-i\hbar) \cdot (ik) \cdot dx = \hbar k \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = \hbar k = p \end{aligned} \quad (1.37)$$

Der Impuls einer ebenen Welle entspricht also genau dem Erwartungswert $\langle p \rangle$.

1.2.5 Heisenberg'sche Unschärferelation

Im obigen Beispiel haben wir gesehen, dass der Impuls einer ebenen Welle exakt bestimmt ist, während deren Ort unbekannt ist (da sich die Welle von $-\infty$ bis ∞ erstreckt). Es stellt sich heraus, dass diese Feststellung die Folge einer tieferliegenden Tatsache ist:

Der Ort und der Impuls einer Welle sind nie gleichzeitig exakt bestimmbar.

„Wie genau“ sind die beiden Grössen nun bestimmbar? Wie wir anhand der folgenden Beispiele sehen werden, muss das Produkt von Orts- und Impulsunschärfe immer grösser oder gleich $\hbar/2$ sein:

$$\boxed{\sigma_x \cdot \sigma_p \geq \frac{\hbar}{2}} \quad \text{Heisenberg'sche Unschärferelation} \quad (1.38)$$

Diese Beziehung wird als die *Heisenberg'sche Unschärferelation* bezeichnet.

Beispiel: Beugung am Spalt

Wir betrachten ein Teilchen, welches einen Spalt der Breite b passiert (siehe Abb. 1.4). Das heisst, beim Spaltdurchtritt ist die Position des Teilchens mit einer Genauigkeit von

$$\Delta x \approx \frac{b}{2} \quad (1.39)$$

bekannt. Andererseits können wir den vertikalen Impuls aus der Auftreffposition am Detektor bestimmen:

$$p_x \approx p \sin \alpha \quad (1.40)$$

Hier ist $\sin \alpha$ der Beugungswinkel und $p = h/\lambda$ ist der Impuls des einfallenden Teilchens. Nehmen wir als typischen Ablenkungswinkel das erste Beugungsminimum, so ist $\sin \alpha_{\min} \approx \lambda/b$. Das heisst, den vertikalen Impuls kennen wir mit einer Genauigkeit von ungefähr:

$$\Delta p_x \approx p \sin \alpha_{\min} \approx \frac{h}{\lambda} \frac{\lambda}{b} = \frac{h}{b} \quad (1.41)$$

Das Produkt von Δx und Δp_x ist:

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \approx \frac{b}{2} \frac{h}{b} = \frac{h}{2} \quad (1.42)$$

Das heisst, die Messgenauigkeit von Ort und Impuls ist durch die Planck'sche Konstante miteinander verknüpft.

Beispiel: Gaussförmiges Wellenpaket

Als zweites Beispiel bestimmen wir die Unschärferelation anhand eines gaussförmigen Wellenpaketes exakt. Das Wellenpaket habe die Wellenfunktion:

$$\psi(x, t) = \psi_0 \cdot e^{-\frac{(x-ct)^2}{4\sigma_x^2}} \cdot e^{i(kx-\omega t+\varphi)} \quad (1.43)$$

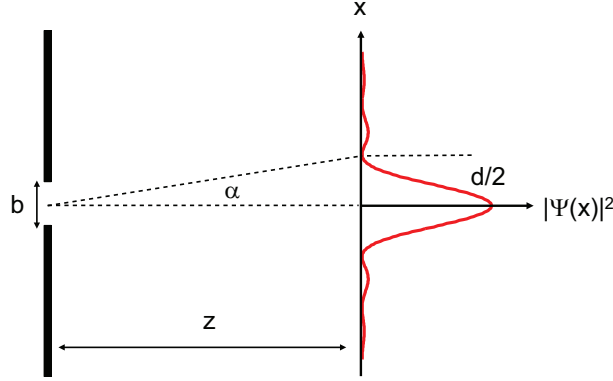


Abbildung 1.4: Beugung eines Teilchens am Einfachspalt. d bezeichne den Abstand der ersten Minima.

Der Erwartungswert des Ortes und Impulses zur Zeit $t = 0$ sind:

$$\langle x \rangle = 0 \quad (1.44)$$

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \cdot \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \cdot \psi(x) dx = \hbar k = p \quad (1.45)$$

Die „Unschärfe“ bestimmen wir nun aus der Standardabweichung von x und p . Dazu berechnen wir den Erwartungswert des Quadrates:

$$\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \cdot x^2 \cdot \psi(x) dx = \sigma_x^2 \quad (1.46)$$

$$\langle p^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \cdot \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right)^2 \cdot \psi(x) dx = \hbar^2 k^2 + \frac{\hbar^2}{4\sigma_x^2} = p^2 + \frac{\hbar^2}{4\sigma_x^2} \quad (1.47)$$

Die Standardabweichungen sind:

$$\sigma_x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} = \sigma_x \quad (1.48)$$

$$\sigma_p = \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2} = \frac{\hbar}{2\sigma_x} \quad (1.49)$$

Das Produkt der Standardabweichungen ist:

$$\sigma_x \cdot \sigma_p = \frac{\hbar}{2} \quad (1.50)$$

Für das gaussförmige Wellenpaket gilt die Heisenberg'sche Relation exakt.

Unschärferelation für Zeit und Energie

Neben dem Ort/Impuls gibt es noch weitere komplementäre Grössen, für welche die Heisenberg'sche Unschärferelation gilt. Beispiele sind Energie und Zeit, hier gilt:

$$\sigma_E \cdot \sigma_t \geq \frac{\hbar}{2} \quad (1.51)$$

da $\sigma_x = c\sigma_t$ und $\sigma_p = \sigma_E/c$. Das heisst, um die Energie eines Teilchens genau zu bestimmen, muss man das Teilchen über eine bestimmte Zeitdauer beobachten. Dies lässt sich intuitiv anhand einer ebenen Welle verstehen: Um die Frequenz exakt zu bestimmen, muss man die Welle über viele Perioden beobachten, und je länger die Beobachtung dauert, desto genauer die Frequenzmessung. Da die Frequenz $E = h\nu$ direkt mit der Energie zusammenhängt, sind die Unschärfen in Zeit und Energie direkt miteinander verknüpft.

1.3 Energieniveaus

Literatur: Tipler Kap. 34,35, Tipler/Llewellyn Kap. 5,6

Im letzten Kapitel haben wir gesehen, dass Teilchen (wie Elektronen) eine Wellenfunktion haben und Welleneigenschaften zeigen. In diesem Kapitel werden wir die dazugehörige Wellengleichung aufstellen, die sogenannte Schrödingergleichung. Dann werden wir zeigen, dass gebundene Teilchen (wie Elektronen in einem Atom) *stehenden Wellen* entsprechen. Jeder stehenden Welle ist eine Frequenz und damit eine Energie zugeordnet. Wir diskutieren dann das Konzept der *Energieniveaus*, welches für das Verständnis der modernen Physik absolut zentral ist.

1.3.1 Schrödingergleichung

Da es sich bei Materiewellen um Wellen handelt, lässt sich eine zugehörige Wellengleichung finden. Da Energieerhaltung gilt, muss die Summe aus kinetischer und potentieller Energie gleich der Gesamtenergie sein:

$$E_{kin} + E_{pot} = E \quad (1.52)$$

Wir multiplizieren nun die Energie mit der Wellenfunktion $\psi(x, t)$ und ersetzen die kinetische Energie durch den Impuls:

$$\frac{p^2}{2m} \psi(x, t) + E_{pot} \psi(x, t) = E \psi(x, t) \quad (1.53)$$

Drücken wir nun die kinetische Energie und die Gesamtenergie durch Impuls und Energie einer Welle aus (siehe Kapitel 1.2.2), so findet man:

$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} + E_{pot}(x, t) \cdot \psi(x, t) = i\hbar \cdot \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t}$	zeitabhängige Schrödingergleichung	(1.54)
---	---------------------------------------	--------

Dies ist die Wellengleichung für Materiewellen, welche *Schrödingergleichung* genannt wird.

Die Schrödingergleichung ist die Grundgleichung der Quantenmechanik und hat eine ähnlich fundamentale Bedeutung wie die Maxwell'schen Gleichungen im Elektromagnetismus und die Newton'schen Axiome in der Mechanik.

Zeitunabhängige Schrödingergleichung

Eine besonders wichtige Gruppe sind Wellen mit konstanter Energie E . Diese Wellen besitzen eine einzige Frequenz $\omega = E/\hbar$, sodass:

$$\psi(x, t) = \psi(x) \cdot e^{-i\omega t} \quad (1.55)$$

Es handelt sich also um *stehende Wellen*, da der örtliche und zeitliche Anteil der Wellenfunktion voneinander getrennt sind. Setzt man die stehende Welle in die Schrödingergleichung ein, so findet man:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} e^{-i\omega t} + E_{pot}(x) \cdot \psi(x) e^{-i\omega t} = \hbar\omega \cdot \psi(x) e^{-i\omega t} \quad (1.56)$$

Kürzt man mit $e^{-i\omega t}$, so folgt für den ortsabhängigen Teil:

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + E_{pot}(x) \cdot \psi(x) = E \cdot \psi(x)} \quad \begin{array}{l} \text{zeitunabhängige} \\ \text{Schrödingergleichung} \end{array} \quad (1.57)$$

Zusammengefasst heisst dies:

Für stehende Wellen ist die Gesamtenergie konstant.

1.3.2 Freie und gebundene Teilchen

Die beiden Fälle von ebenen und stehenden Wellen haben eine klare physikalische Bedeutung:

- Freie Teilchen sind äquivalent zu einem Wellenpaket, das sich wie eine ebene Welle ausbreitet. Freie Teilchen sind durch die zeitabhängige Schrödingergleichung bestimmt. Beispiele sind Elektronenstrahlen, wie sie bei Interferenz- und Beugungsexperimenten vorkommen.
- Gebundene Teilchen sind äquivalent zu stehenden Wellen. Die Gesamtenergie und die Wellenform (Wahrscheinlichkeitsdichte) sind konstant und durch die zeitunabhängige Schrödingergleichung gegeben. Ein Beispiel ist das Elektron in der Atomhülle.

1.3.3 Das Teilchen im Kasten

Wir betrachten nun das einfachste Beispiel eines gebundenen Teilchens. Das Teilchen sei zwischen zwei Wänden im Abstand L eingesperrt, zwischen denen es sich hin- und herbewegen kann. Die Wände bilden einen „Kasten“ (oder „Potentialtopf“), aus dem das Teilchen nicht entweichen kann. Da das Teilchen eingeschlossen ist, muss die Gesamtenergie des Systems konstant sein, und es gilt die zeitunabhängige Schrödingergleichung.

Wir wollen nun bestimmen, welche (stehenden) Wellen die Wellengleichung lösen. Dazu benötigen wir zuerst die potentielle Energie des Kastens als Funktion des Ortes:

$$E_{pot}(x) = \begin{cases} 0 & \text{falls } 0 < x < L \\ \infty & \text{sonst} \end{cases} \quad (1.58)$$

Das heisst, innerhalb des Kastens ist die potentielle Energie gleich Null, ausserhalb unendlich. Die Schrödingergleichung innerhalb des Kastens ist also:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} = E \cdot \psi(x) \quad (1.59)$$

Für die Wellenfunktion machen wir nun den folgenden Ansatz:

$$\psi(x) = \psi_{0,A} \sin(kx) + \psi_{0,B} \cos(kx) \quad (1.60)$$

Einsetzen in die Schrödingergleichung ergibt:

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (1.61)$$

Da die Wellenfunktion stetig sein muss, sind nicht alle Lösungen für $\psi(x)$ erlaubt, sondern nur diejenigen, die an den Wänden gleich Null sind:

$$\psi(0) = 0 \quad (1.62)$$

$$\psi(L) = 0 \quad (1.63)$$

Daraus folgt erstens, dass $\psi_{0,B} = 0$. Zweitens sind für den Wellenvektor k nur folgende Werte zugelassen:

$$k_n = \frac{\pi}{L} n \quad \text{mit } n = 1, 2, 3, \dots \quad (1.64)$$

Diese Situation kennen wir schon! Die erlaubten Lösungen entsprechen genau den stehenden Wellen einer eingespannten Saite. Neu ist hingegen die Interpretation der Wellenamplitude als Wahrscheinlichkeitsdichte des Teilchens.

Was ist nun der Wert von $\psi_{0,A}$? Da sich das Teilchen mit Sicherheit innerhalb des Kastens befindet, muss die integrierte Wahrscheinlichkeitsdichte gleich eins sein:

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} P(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = \int_0^L |\psi_n(x)|^2 dx = \frac{L}{2} \psi_{0,A}^2 \quad (1.65)$$

Dies ist die *Normierungsbedingung*. Daraus ergibt sich für $\psi_{0,A}$:

$$\psi_{0,A} = \sqrt{\frac{2}{L}} \quad (1.66)$$

Die Lösungen der Wellengleichung sind also:

$$\boxed{\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi n x}{L}\right)} \quad \text{Wellenfunktionen des Teilchens im Kasten} \quad (1.67)$$

mit Index $n = 1, 2, 3, \dots$

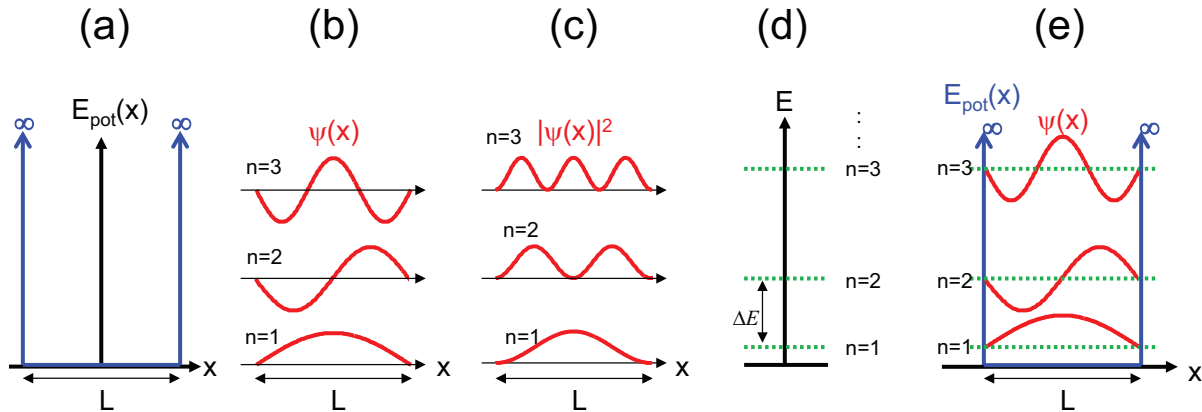


Abbildung 1.5: Teilchen im Kasten: (a) Potential. (b) Wellenfunktion. (c) Wahrscheinlichkeitsdichte. (d) Energieniveaus. (e) Kombiniertes Energieniveaudiagramm

1.3.4 Energieniveaus

Aus der Tatsache, dass nur ganz bestimmte Wellenvektoren k_n erlaubt sind, folgt unmittelbar, dass auch nur ganz bestimmte Energien E_n erlaubt sind (siehe Abb. 1.5):

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{h^2 n^2}{8mL^2} \quad \text{mit} \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad \begin{array}{l} \text{Energieniveaus des} \\ \text{Teilchens im Kasten} \end{array} \quad (1.68)$$

Die erlaubten Energien (und Wellenfunktionen) werden auch „Zustände“ oder „Energieniveaus“, und der Index n wird *Quantenzahl* genannt. Dies ist ein fundamentales Konzept der Quantenphysik:

Ein gebundenes Teilchen kann sich nur in bestimmten Zuständen mit einer bestimmten Energie befinden.

Wir werden sehen, dass es pro Freiheitsgrad (hier eine räumliche Dimension) genau eine Quantenzahl gibt.

Die tiefste Energie (hier $n = 1$) hat eine spezielle Bedeutung, da sich gemäss dem Energieminimumprinzip (siehe Anhang „Erhaltungssätze“ B) ein Teilchen bevorzugt im Zustand tiefster Energie befindet. Für das Teilchen im Kasten ist diese Energie:

$$E_1 = \frac{h^2}{8mL^2} \quad \text{Grundzustandsenergie des Teilchens im Kasten} \quad (1.69)$$

E_1 wird auch als *Energie des Grundzustandes* oder *Nullpunktsenergie* bezeichnet.

Für das Teilchen im Kasten findet man:

- Die Energie, welche der längsten erlaubten Wellenlänge entspricht, ist grösser als Null!
- Die Energie ist umgekehrt proportional zum Quadrat der Kastenbreite L .

Beispiel: Elektron in einem Kasten mit Länge $L = 1$ nm

$$E_1 = \frac{(6.63 \cdot 10^{-34} \text{ J s})^2}{8 \cdot 9.11 \cdot 10^{-31} \text{ kg} \cdot (10^{-9} \text{ m})^2} \approx 6.03 \cdot 10^{-20} \text{ J} \approx 0.377 \text{ eV} \quad (1.70)$$

$$\lambda = \frac{hc}{E} = 3.28 \text{ } \mu\text{m} \quad \text{Wellenlänge eines Photons mit gleicher Energie} \quad (1.71)$$

Kapitel 2

Atomphysik

2.1 Das Atom

Literatur: Tipler Kap. 36, Tipler/Llewellyn Kap. 7

Analog zum Teilchen im Kasten lassen sich die Elektronen eines Atoms als stehende Wellen beschreiben. Die Elektronen sind dabei durch das (dreidimensionale) Coulombpotential des Atomkerns gebunden. Wir bestimmen im Folgenden anhand von zwei Modellen, dem Bohrmodell und dem Orbitalmodell, die Energieniveaus für die Elektronen in einem Atom. Zusätzlich betrachten wir was geschieht, wenn ein Atom mehrere (nicht nur ein) Elektron besitzt. Das Atommodell ist die Grundlage, um später Moleküle und Festkörper zu beschreiben.

Experiment: Spektrum von Zinkdampf

Experiment: Franck-Hertz-Experiment mit Neon

2.1.1 Bohr'sches Atommodell

Im Bohr'schen Atommodell wird das Atom durch einem schweren, positiv geladenen Kern beschrieben, welcher von einem (oder mehreren) leichten, negativ geladenen Elektron auf einer geschlossenen Bahn umkreist wird. Obwohl dieses Modell offensichtlich sehr verschieden vom Konzept der Wellenfunktionen ist, liefert es überraschenderweise für viele der grundlegenden Eigenschaften der Atome die richtige Erklärung. Insbesondere sagt es die korrekten Energieniveaus und die daraus abgeleiteten Atomspektren voraus. Deshalb und weil das Modell sehr einfach und intuitiv ist, wird es bis heute benutzt, obwohl die quantenmechanische Beschreibung durch die Schrödingergleichung eigentlich genauer wäre.

Energie in einer kreisförmigen Umlaufbahn

Für ein Elektron, das sich auf einer stationären, kreisförmigen Umlaufbahn um den Atomkern befindet, muss die Coulombkraft gleich der Zentripetalkraft sein:

$$-\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} = -\frac{m_e v_e^2}{r} \quad (2.1)$$

Hier ist r der Radius, v_e die Geschwindigkeit, m_e die Masse des Elektrons, e die Elementarladung und Z die Kernladungszahl. Die kinetische Energie des Elektrons ist:

$$E_{kin} = \frac{1}{2} m_e v_e^2 = \frac{Ze^2}{8\pi\epsilon_0 r} \quad (2.2)$$

Die potentielle (elektrostatische) Energie ist:

$$E_{pot} = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (2.3)$$

Man sieht also, dass $E_{pot} = -2E_{kin}$, sodass für die Gesamtenergie gilt:

$$E = E_{pot} + E_{kin} = \frac{1}{2} E_{pot} = -\frac{Ze^2}{8\pi\epsilon_0 r} \quad (2.4)$$

Experiment: Modell des klassischen Atoms

Bohr'sche Postulate

Bis hierhin entsprechen die Umlaufbahnen vollumfänglich der klassischen Mechanik und die Elektronen können sich auf jedem beliebigen Radius r befinden. In der Realität findet man jedoch, dass nur ganz bestimmte Radien r vorkommen („erlaubt sind“). Dazu stellten Bohr und de Broglie die folgenden drei Postulate auf:

1. *Die Elektronen können sich nur in bestimmten Umlaufbahnen aufhalten. Die Länge einer Umlaufbahn muss genau einem Vielfachen der de-Broglie Wellenlänge entsprechen.*
2. *Die Umlaufbewegung erfolgt ohne Energieverlust (strahlungsfrei).*
3. *Wechselt das Elektron zwischen zwei Bahnen, so wird die Energie von aussen aufgenommen oder nach aussen abgegeben. Dabei gilt Energieerhaltung.*

Aus dem ersten Postulat können wir nun die erlaubten Radien berechnen:

$$2\pi r_n = n\lambda = \frac{nh}{p_n} \quad (2.5)$$

Hier ist $n = 1, 2, 3, \dots$ eine ganze Zahl und r_n der Radius, bei dem gerade n Wellenlängen in den Umfang passen. Da das Produkt von Impuls und Radius gleich dem Drehimpuls ist, findet man aus der obigen Beziehung:

$$L_n = p_n r_n = n \frac{h}{2\pi} = n\hbar \quad (2.6)$$

In anderen Worten:

Bei den erlaubten Umlaufbahnen ist der Drehimpuls ein ganzzahliges Vielfaches von \hbar .

2.1.2 Energieniveaus von Eielektronenatomen

Anhand der Bohr'schen Postulate können wir auch die erlaubten Radien und die Energieniveaus eines Eielektronenatoms explizit berechnen. Indem man die Kraftgleichung nach $L_n = p_n r_n = m_e v_{e,n} r_n$ auflöst, erhält man:

$$\sqrt{\frac{Ze^2 m_e r_n}{4\pi\epsilon_0}} = m_e v_{e,n} r_n = n\hbar \quad (2.7)$$

Daraus berechnet sich der Radius als:

$$\boxed{r_n = \frac{n^2}{Z} \left(\frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{e^2 m_e} \right) = \frac{n^2}{Z} a_0} \quad \text{Elektronenradius im Bohrmodell} \quad (2.8)$$

Der Radius für den Grundzustand ($n = 1$) des Wasserstoffatoms (Kernladungszahl $Z = 1$) ist:

$$\boxed{a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{e^2 m_e} = 0.0529 \text{ nm}} \quad \text{Bohrradius} \quad (2.9)$$

Die Energie des n -ten Niveaus ist:

$$E_n = -E_{kin} = -\frac{1}{2} m_e v_{e,n}^2 = -\frac{1}{2m_e} \left(\frac{L_n}{r_n} \right)^2 = -\frac{1}{2m_e} \left(\frac{n\hbar}{r_n} \right)^2 \quad (2.10)$$

$$\Rightarrow \boxed{E_n = -\frac{Z^2}{n^2} \left(\frac{m_e e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} \right) = -\frac{Z^2}{n^2} E_R} \quad \text{Energieniveaus im Bohrmodell} \quad (2.11)$$

Hier ist $E_R = 13.6$ eV die Rydberg-Energie. Diese entspricht betraglich der Energie des Grundzustandes im Wasserstoffatom:

$$\boxed{-E_R = -\frac{m_e e^4}{32\pi^2 \varepsilon_0^2 \hbar^2} = -hcR_H = -13.6 \text{ eV}} \quad \begin{array}{l} \text{Energie des Grundzustandes} \\ \text{des Wasserstoffatoms} \end{array} \quad (2.12)$$

Die Konstante R_H ist die sogenannte *Rydbergkonstante*, welche bei der Interpretation von Lichtspektren der Atome eine zentrale Rolle spielt (siehe Kapitel 2.2.1).

Frage: Was ist 13.6 eV in anderen Einheiten?

2.1.3 Wellengleichung des Einelektronenatoms

Wir werden nun die Energieniveaus und Wellenfunktionen des Einelektronenatoms im quantenmechanischen Modell anhand der Schrödingergleichung betrachten. Da die Herleitung relativ kompliziert und umfangreich ist, werden wir uns auf die wichtigsten Aspekte und Lösungen konzentrieren. (Eine detaillierte Herleitung ist z.B. in *Tipler/Llewellyn, Kapitel 7* gegeben.)

Schrödingergleichung in Polarkoordinaten

Als erstes müssen wir die Schrödingergleichung auf drei Dimensionen erweitern:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi(x, y, z) + E_{pot}(x, y, z) \cdot \psi(x, y, z) = E \cdot \psi(x, y, z) \quad (2.13)$$

Hier ist $E_{pot}(x, y, z)$ das Coulombpotential des positiv geladenen Atomkerns am Ursprung:

$$E_{pot}(x, y, z) \equiv E_{pot}(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}, \quad (2.14)$$

wobei r der radiale Abstand und Z die Ladung des Kerns ist. Da das Coulombpotential kugelsymmetrisch ist, ist die Schrödingergleichung einfacher zu lösen, wenn sie in Polarkoordinaten statt in kartesischen Koordinaten ausgedrückt wird:

$$x = r \cdot \sin \vartheta \cdot \cos \varphi \quad (2.15)$$

$$y = r \cdot \sin \vartheta \cdot \sin \varphi \quad (2.16)$$

$$z = r \cdot \cos \vartheta \quad (2.17)$$

Hier ist r wiederum der Radius, ϑ der Polarwinkel und φ der Azimuthwinkel, wie in Abb. 2.1 veranschaulicht.

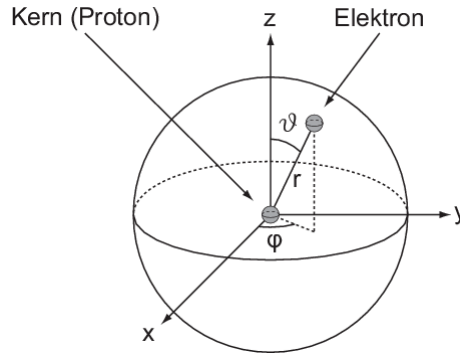


Abbildung 2.1: Polarkoordinaten

Nun müssen wir die zweifache Ableitung in Polarkoordinaten umformen, was eine umfangreichere Herleitung benötigt. Als Resultat ist die Schrödingergleichung in Polarkoordinaten:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\underbrace{\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left[r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right]}_{\text{radiale Ableitung}} + \underbrace{\frac{1}{r^2 \sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left[\sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right] + \frac{1}{r^2 \sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}}_{\text{Winkelableitung}} \right) \psi(r, \vartheta, \varphi) + E_{\text{pot}}(r) \psi(r, \vartheta, \varphi) = E \psi(r, \vartheta, \varphi) \quad (2.18)$$

Man sieht, dass nun die radiale Ableitung und die Winkelableitungen voneinander getrennt sind. Dies vereinfacht das Problem, da man nun die radiale getrennt von der winkelabhängigen Gleichung lösen kann.

Lösungen der Schrödingergleichung

Die Lösungen der Schrödingergleichung sind:

$$\psi_{nlm_l}(r, \vartheta, \varphi) = \underbrace{\sqrt{\left(\frac{2}{na_0}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n(n+l)!}}}_{\text{Normierung}} \cdot \underbrace{e^{-\rho/2} \rho^l L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho)}_{\text{radiale Wellenfunktion}} \cdot \underbrace{Y_l^{m_l}(\vartheta, \varphi)}_{\substack{\text{winkelabhängige} \\ \text{Wellenfunktion}}} \quad (2.19)$$

Wir stellen fest, dass der radiale und der winkelabhängige Anteil der Wellenfunktion tatsächlich voneinander getrennt sind. Die beiden Anteile sind durch bestimmte Polynome gegeben (siehe Anhang „Polynome“ C): $L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho)$ ist das erweiterte Laguerre-Polynom, und $Y_l^{m_l}(\vartheta, \varphi)$ ist eine Kugelflächenfunktion.

$$\rho = \frac{2Zr}{na_0} \quad (2.20)$$

ist der reduzierte Radius und

$$\boxed{n, l, m_l} \quad \text{Quantenzahlen des Einelektronenatoms} \quad (2.21)$$

sind die drei *Quantenzahlen* des Einelektronenatoms, welche mit den drei Koordinaten r , ϑ und φ verknüpft sind.

Einige Beispiele von Wellenfunktionen für die tiefsten Werte von n, l, m_l sind in der folgenden Tabelle 2.1 gegeben:

$\psi_{100} = \sqrt{\frac{1}{\pi a_0^3}} \cdot e^{\frac{-r}{a_0}}$	$\psi_{210} = \sqrt{\frac{1}{32\pi a_0^3}} \cdot \frac{r}{a_0} e^{\frac{-r}{2a_0}} \cdot \cos \vartheta$
$\psi_{200} = \sqrt{\frac{1}{32\pi a_0^3}} \cdot \left(2 - \frac{r}{a_0}\right) e^{\frac{-r}{2a_0}}$	$\psi_{21\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{1}{64\pi a_0^3}} \cdot \frac{r}{a_0} e^{\frac{-r}{2a_0}} \cdot \sin \vartheta \cdot e^{\pm i\varphi}$
$\psi_{300} = \sqrt{\frac{1}{19683\pi a_0^3}} \cdot \left(27 - 18\frac{r}{a_0} + 2\frac{r^2}{a_0^2}\right) e^{\frac{-r}{3a_0}}$	

Tabelle 2.1: Beispiele von Wellenfunktionen

Die Energien der Zustände n, l, m_l erhält man, indem man die zugehörige Wellenfunktion in die Schrödingergleichung einsetzt. Man findet, dass die Energien nur von der radialen Quantenzahl n abhängen und identisch sind mit denjenigen des Bohrmodells:

$$\boxed{E_{n,l,m_l} = E_n = -\frac{Z^2}{n^2} \left(\frac{m_e e^4}{32\pi^2 \varepsilon_0^2 \hbar^2} \right) = -\frac{Z^2}{n^2} E_R} \quad \text{Energieniveaus im quantenmechanischen Modell} \quad (2.22)$$

In anderen Worten bedeutet dies:

- Das Bohrmodell und das quantenmechanische Modell ergeben dieselben Energieniveaus.
- Die Energie eines Niveaus hängt nur von der radialen Quantenzahl n ab. Zustände mit unterschiedlichen Quantenzahlen l und m_l , aber demselben n haben dieselbe Energie (sind entartet).

Beispiel: Herleitung der Wellenfunktion des Wasserstoffatoms im Grundzustand

Als Beispiel leiten wir die Wellenfunktion und Energie des Wasserstoffatoms im Grundzustand her. Dazu machen wir für die Wellenfunktion den Ansatz:

$$\psi(r, \vartheta, \varphi) = \psi_0 e^{-\alpha r} \quad (2.23)$$

Einsetzen in die Schrödingergleichung ergibt:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \cdot \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left[r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right] - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \psi = E \cdot \psi \quad (2.24)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \cdot \frac{1}{r^2} [-2\alpha r + \alpha^2 r^2] \cdot \psi - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \psi = E \cdot \psi \quad (2.25)$$

$$\underbrace{\left(\frac{\hbar^2 \alpha}{m_e} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \right)}_{(a)} \frac{\psi}{r} + \underbrace{\left(-\frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m_e} - E \right)}_{(b)} \psi = 0 \quad (2.26)$$

Wir bestimmen nun α und E . Aus Gleichung 2.26(a) $\stackrel{!}{=} 0$ folgt:

$$\alpha = \frac{e^2 m_e}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2} = \frac{1}{a_0} \quad (2.27)$$

α ist also genau der Kehrwert des Bohrradius a_0 . Aus Gleichung 2.26(b) $\stackrel{!}{=} 0$ folgt:

$$E = -\frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m_e} = -\frac{m_e e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} = E_1 \quad (2.28)$$

Die Energie des Grundzustandes ist also identisch mit der Energie, welche wir aus dem Bohrmodell gefunden haben. Dass das Bohrmodell die richtige Grundzustandsenergie ergibt, ist ein wichtiger Grund für den Erfolg des Modells.

Setzt man α ein, so ist die Wellenfunktion:

$$\psi(r, \vartheta, \varphi) = \psi_0 e^{\frac{-r}{a_0}} \quad (2.29)$$

Die Amplitude ψ_0 der Wellenfunktion ist bestimmt durch die Normierungsbedingung:

$$\begin{aligned} 1 &= \int |\psi(r, \vartheta, \varphi)|^2 dV = \int_{r=0}^{\infty} \int_{\vartheta=0}^{\pi} \int_{\varphi=0}^{2\pi} \psi_0^2 e^{-2\alpha r} dr \cdot (r \sin \vartheta \cdot d\varphi) \cdot (r \cdot d\vartheta) \\ &= 4\pi \psi_0^2 \int_{r=0}^{\infty} r^2 e^{-2\alpha r} dr = \frac{\pi \psi_0^2}{\alpha^3} = \pi a_0^3 \psi_0^2 \end{aligned} \quad (2.30)$$

Daraus folgt:

$$\psi_0 = \sqrt{\frac{1}{\pi a_0^3}} \quad (2.31)$$

Die Wellenfunktion ist also:

$$\psi(r, \vartheta, \varphi) = \sqrt{\frac{1}{\pi a_0^3}} e^{\frac{-r}{a_0}} \quad (2.32)$$

	Radiale Quantenzahl	Drehimpuls- quantenzahl	Magnetische Quantenzahl
Symbol	n	l	m_l
Mögliche Werte	$n = 1, 2, 3, \dots$	$l = 0, 1, \dots, n - 1$	$m_l = -l, -l + 1, \dots, l - 1, l$
Assoziierte Polarkoordinate	r	ϑ	φ
Assoziierte physikalische Größen	Energie: $E_n = -E_R Z^2 / n^2$	Drehimpuls (Betrag): $L = \sqrt{l(l+1)}\hbar$	Drehimpuls (z-Komponente): $L_z = m_l \hbar$ Magnetischer Dipol: $m_z = -\mu_B m_l$
Merkmal in Wellenfunktion	Ist gleich der totalen Anzahl Knoten plus eins	Ist gleich der Anzahl Knotenebenen	Bestimmt die Lage der Knotenebene(n)

Tabelle 2.2: Eigenschaften der verschiedenen Quantenzahlen

Zum Schluss berechnen wir noch zwei nützliche Größen: Die Wahrscheinlichkeitsdichte und die sogenannte radiale Wahrscheinlichkeitsdichte. Die Wahrscheinlichkeitsdichte ist:

$$|\psi(r, \vartheta, \varphi)|^2 = \frac{1}{\pi a_0^3} e^{\frac{-2r}{a_0}} \quad (2.33)$$

Die radiale Wahrscheinlichkeitsdichte $P(r)$ ist die Wahrscheinlichkeit, das Elektron in einem bestimmten Abstand r vom Zentrum zu finden. Dazu integrieren wir über die beiden Winkel:

$$P(r) = \int_{\vartheta=0}^{\pi} r \cdot d\vartheta \int_{\varphi=0}^{2\pi} r \sin \vartheta \cdot d\varphi |\psi(r, \vartheta, \varphi)|^2 = 4\pi r^2 |\psi(r, \vartheta, \varphi)|^2 = \frac{4r^2}{a_0^3} e^{\frac{-2r}{a_0}} \quad (2.34)$$

2.1.4 Quantenzahlen des Einelektronenatoms

Wie wir gesehen haben, gibt es beim Einelektronenatom drei Quantenzahlen (n, l, m_l) , je eine pro räumliche Dimension, welche mit den drei Koordinaten (r, ϑ, φ) verknüpft sind. Die möglichen Werte für die Quantenzahlen n, l, m_l sind in der Tabelle 2.2 zusammengefasst.

Radiale Quantenzahl (Hauptquantenzahl) n

Die radiale Quantenzahl n bestimmt den radialen Anteil der Wellenfunktion und somit die Wahrscheinlichkeit, das Elektron in einem bestimmten Abstand vom Kern vorzufinden.

Die Gesamtzahl „Knoten“ in der Wellenfunktion (siehe Teilchen im Kasten, Kap. 1.3.3) ist gegeben durch $n - 1$.

Drehimpulsquantenzahl l

Die Drehimpulsquantenzahl l bestimmt zusammen mit der magnetischen Quantenzahl m_l den winkelabhängigen Anteil der Wellenfunktion. l ist gleich der Anzahl Knotenebenen. Der Betrag des Drehimpulses ist gegeben durch:

$$L = \sqrt{l(l+1)}\hbar \quad (2.35)$$

Magnetische Quantenzahl m_l

Die magnetische Quantenzahl m_l gibt die Komponente des Drehimpulses entlang einer bestimmten Raumrichtung an. Als Standardrichtung benutzt man hier meist die z-Richtung. (Hinweis: Da das Coulombpotential kugelsymmetrisch ist, kommt es nicht darauf an, auf welche Richtung man sich festlegt.) Die z-Komponente des Drehimpulses ist gegeben durch:

$$L_z = m_l \hbar \quad (2.36)$$

Der Name „magnetische Quantenzahl“ kommt daher, dass der Drehimpuls mit dem magnetischen Dipol des Atoms verknüpft ist. Wie in der Vorlesung Physik 1 (Kapitel 3.1.3) besprochen, entspricht die Kreisbewegung des Elektrons um den Atomkern einem Kreisstrom I mit magnetischem Dipol \vec{m} :

$$\vec{m} = I\pi r^2 \vec{n} = \frac{1}{2}(-e)(\vec{r} \times \vec{v}) = -\frac{1}{2}e(\vec{r} \times \vec{p}/m_e) = -\frac{e}{2m_e}\vec{L} \quad (2.37)$$

Die z-Komponente des Dipols ist dann gegeben durch:

$$m_z = -\frac{e}{2m_e}L_z = -\frac{e\hbar}{2m_e}m_l = -\mu_B m_l \quad (2.38)$$

Hier ist $\mu_B = 9.274 \cdot 10^{-24} \text{ J/T}$ ist das sogenannte *Bohr-Magneton*.

Vergleicht man das quantenmechanische Modell mit dem Bohrmodell, stellt man einige wichtige Unterschiede fest:

- Im Bohrmodell gibt es nur eine Quantenzahl. Diese beschreibt die stehenden Wellen um den Kern, entspricht also der Drehimpulsquantenzahl. Die radiale Quantenzahl n und die Bohr'sche Quantenzahl n haben also nicht exakt die gleiche Bedeutung.
- Im Bohrmodell gibt es keine Entartung.
- Im Bohrmodell hat das Elektron im Grundzustand einen Drehimpuls von $L = \hbar$, während im quantenmechanischen Modell im Grundzustand $L = 0$ ist.

Orbitalsymbole

Neben den Quantenzahlen n, l, m_l ist eine zweite Nomenklatur in Gebrauch, welche als *Orbitalsymbole* bezeichnet werden. In der Schreibweise der Orbitalsymbole wird l durch einen Buchstaben, und m_l durch die räumliche Lage der Knotenebene (der Kugelflächenfunktion) angegeben. Die folgende Abbildung 2.2 zeigt die Entsprechung zwischen Quantenzahlen und Orbitalsymbol.

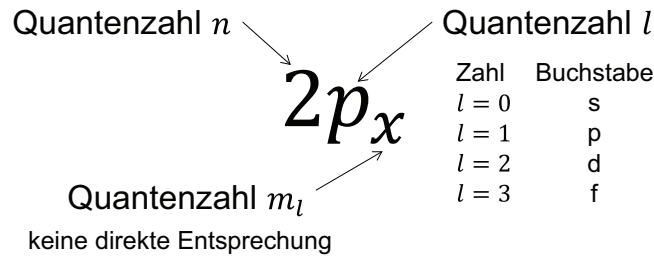


Abbildung 2.2: Orbitalsymbole

2.1.5 Eigendrehimpuls (Spin)

Neben dem Bahndrehimpuls besitzt das Elektron auch einen Eigendrehimpuls, der auch *Spin* genannt wird. Der Spin verhält sich zwar in seinen Eigenschaften analog zum mechanischen Drehimpuls, welcher durch die Rotation eines Teilchens um die eigene Achse zustande kommen würde. Fundamentale Teilchen wie das Elektron sind jedoch punktförmig und ihr Spin benötigt die Quantenmechanik, um begründet zu werden (z.B. hat ein punktförmiges Teilchen mit einer kinetischen Energie von Null einen endlichen Spin und kann deshalb nicht klassisch durch eine rotierende Masse erklärt werden).

Der Eigendrehimpuls des Elektrons hat für alle Elektronen einen fixen Wert mit dem Betrag:

$$S = \sqrt{\frac{3}{4}}\hbar = \sqrt{s(s+1)}\hbar \quad (2.39)$$

und der z-Komponente:

$$S_z = m_s\hbar = \pm\frac{1}{2}\hbar \quad (2.40)$$

Diese Werte erhält man, indem man annimmt, dass das Elektron eine Drehimpulsquantenzahl mit dem Wert $s = \frac{1}{2}$ besitzt, und eine zugehörige magnetische Quantenzahl, die nun die Werte $m_s = \pm\frac{1}{2}$ annehmen kann.

Der Drehimpuls (Spin) ist eine fundamentale Eigenschaft eines Elementarteilchens, analog zu Masse und Ladung. Der Spin wird durch zwei Quantenzahlen beschrieben, einer Drehimpulsquantenzahl s und einer zugehörigen magnetischen

Quantenzahl m_s .

Da das Elektron einen Eigendrehimpuls besitzt, hat es folglich auch einen magnetischen Dipol. Dessen z-Komponente ist gegeben durch:

$$m_z = -g_e \frac{e\hbar}{2m_e} m_s = -g_e \mu_B m_s \quad (2.41)$$

Im Unterschied zum Bahndrehimpuls tritt beim Spindrehimpuls ein Korrekturfaktor auf, g-Faktor genannt, mit dem Wert $g \approx 2.002$. (Dieser Korrekturfaktor kommt durch relativistische Effekte zustande). Später werden wir sehen (siehe Kap. 2.1.6), dass, unter Zuhilfenahme des Spin-Statistik-Theorems, der Spin des Elektrons zum Pauli-Prinzip führt.

Experiment: Kreisel für Präzession

Experiment: Atomarer Kreisstrom

Experiment: Kernresonanz

2.1.6 Periodensystem

Bisher haben wir nur Atome mit einem einzigen Elektron diskutiert. Diese werden auch als wasserstoffähnliche Atome bezeichnet. Im Folgenden betrachten wir, was geschieht, wenn Atome mehrere Elektronen besitzen.

Wellenfunktionen von Mehrelektronenatomen

Falls ein Atom mehrere Elektronen hat, stoßen sich die Elektronen gegenseitig ab, sodass die Energien und Wellenfunktionen angepasst werden müssen. In diesen Fällen ist die Schrödingergleichung nicht mehr exakt lösbar (nur noch numerisch und näherungsweise). In vielen Fällen sind die Wellenfunktionen des Wasserstoffatoms jedoch immer noch eine gute Näherung.

Pauli-Prinzip (Spin-Statistik-Theorem)

Nach dem Energieminimumprinzip würde man erwarten, dass im Grundzustand alle Elektronen eines Atoms das tiefste Energieniveau einnehmen würden. Dies trifft aber in der Realität nicht zu! Der Grund ist das sogenannte Pauliprinzip, welches einen fundamentalen Zusammenhang zwischen Spin und den erlaubten Zuständen herstellt:

Zwei identische Teilchen mit halbzahligem Spin s können nie in allen Quantenzahlen übereinstimmen.

Für das Elektron (mit Spinquantenzahl $s = 1/2$) bedeutet dies:

Es können sich immer nur genau zwei Elektronen im selben Zustand (n, l, m_l) befinden und dieselbe Wellenfunktion haben.

Der Faktor zwei kommt daher, dass die magnetische Spinquantenzahl die zwei Werte $m_s = \pm 1/2$ annehmen kann.

Die Wellenfunktion eines Mehrelektronenatoms erhält man nun, indem man die Energieniveaus in aufsteigender Energie eines nach dem andern mit Elektronen besetzt. Die Angaben der Quantenzahlen $(n, l, m_l$ plus $m_s)$ für jedes Elektron im Atom nennt man auch dessen *Elektronenkonfiguration*. (Eine Liste der Elektronenkonfigurationen von chemischen Elementen ist z.B. in *Tipler, Kapitel 36.6* gegeben.)

2.2 Absorption und Emission von Licht

Literatur: Tipler Kap. 316-31.8, Tipler/Llewellyn Kap. 9

Bisher haben wir im Detail diskutiert, dass Elektronen nur bestimmte Zustände mit bestimmten Energien annehmen können. Dies hat uns zum Konzept des Energieniveaudiaagramms geführt. Wir haben auch gesehen, dass Elektronen nach dem Energieminimumprinzip tendenziell immer das tiefste freie Energieniveau besetzen.

In diesem Kapitel betrachten wir, wie Elektronen zwischen Energieniveaus hin- und herwechseln können. Dabei muss das Elektron Energie aufnehmen oder abgeben. Diese Anregung kann auf verschiedene Arten geschehen, wie zum Beispiel durch elektrische Energie, thermische Energie (Stöße), chemische Reaktionen, oder Lichtenergie (Photonen). In diesem Kapitel diskutieren wir die Absorption und Emission von Licht.

2.2.1 Atomspektren

Ein Elektron befinde sich in einem Energieniveau mit Energie E_1 . Nun absorbiert es ein Photon und gelangt damit auf ein höheres Energieniveau mit Energie E_2 . Da die Energie erhalten sein muss, muss die Energie des Photons E_{Photon} genau der Energiedifferenz entsprechen:

$$\boxed{E_2 - E_1 = E_{\text{Photon}} = h\nu = \frac{hc}{\lambda}} \quad \text{Absorptions/Emissionsbedingung eines Atoms} \quad (2.42)$$

Hier ist ν die Frequenz und λ die Wellenlänge des Photons. Umgekehrt kann ein Elektron in einem angeregten Zustand E_2 unter Aussendung eines Photons auf das Niveau E_1 zurückfallen. Das heisst, Elektronen können nur Photonen einer ganz bestimmten Wellenlänge absorbieren oder emittieren.

Diese Bedingung ist in Atomspektren gut zu beobachten. Noch bevor das Bohrmodell bekannt war, hat man gefunden, dass Atome Licht von nur ganz bestimmten Wellenlängen absorbieren:

$$\boxed{\frac{1}{\lambda} = R_H Z^2 \left(\frac{1}{n_2^2} - \frac{1}{n_1^2} \right)} \quad \text{Rydbergformel für Eielektronenatome} \quad (2.43)$$

Hier ist $R_H = E_R/(hc) = 1.10 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$ die *Rydbergkonstante*, welche direkt durch die Energie des Grundzustandes E_1 gegeben ist. Die Rydbergformel gilt für wasserstoffähnliche Atome (Eielektronenatome) mit Kernladungszahl Z .

Die Bedingung $E_2 - E_1 = E_{\text{Photon}}$ gilt speziell in Festkörpern meist nicht genau, da ein Photon gleichzeitig mehrere Elektronen oder Gitterschwingungen anregen kann.

Experiment: Spektrum einer Quecksilberdampf Lampe

Experiment: Schatten der Natriumflamme

2.2.2 Einstein'sche Koeffizienten

In einem zweiten Schritt betrachten wir nun wie schnell respektive wie häufig es zu einem Absorptions- oder Emissionsvorgang kommt. Dabei hat man drei elementare Prozesse gefunden, die anhand eines Zwei-Niveausystems veranschaulicht werden können:

1. Absorption: Das Elektron ist im Zustand tieferer Energie, absorbiert ein Photon, und geht in den Zustand höherer Energie über.
2. Spontane Emission: Das Elektron ist im Zustand höherer Energie, emittiert spontan ein Photon und geht in den Zustand tieferer Energie über.
3. Stimulierte Emission: Das Elektron ist im Zustand höherer Energie. Ein einfallendes Photon kann die Emission eines weiteren Photons durch Übergang des Elektrons in den Zustand tieferer Energie induzieren.

Die drei Prozesse sind in der Abbildung 2.3 zusammengefasst.

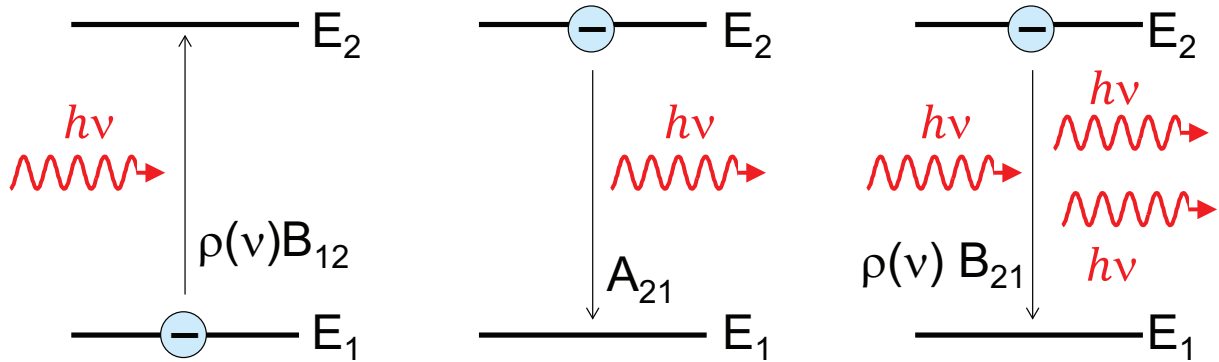


Abbildung 2.3: Absorption (links), spontane Emission (Mitte), stimulierte Emission (rechts)

Die Absorptions- und Emissionsraten gehorchen kinetischen Gleichungen, welche durch Einstein aufgestellt wurden. Dazu betrachtet man nicht ein einzelnes Atom, sondern eine grosse Zahl N von Atomen. Dabei sei N_1 die Anzahl Atome, bei welchen das Elektron im tieferen Energieniveau mit Energie E_1 ist und N_2 die Anzahl Atome, bei welchen das Elektron im höheren Energieniveau mit Energie E_2 ist. Es ist also $N_1 + N_2 = N$. Die kinetischen Gleichungen sind:

$$\frac{\partial N_1}{\partial t} = -\rho(\nu)B_{12}N_1 + \rho(\nu)B_{21}N_2 + A_{21}N_2 \quad (2.44)$$

$$\frac{\partial N_2}{\partial t} = \underbrace{+\rho(\nu)B_{12}N_1}_{\text{Absorption}} - \underbrace{\rho(\nu)B_{21}N_2}_{\text{stim. Emission}} - \underbrace{A_{21}N_2}_{\text{spont. Em.}} \quad (2.45)$$

Hier sind $B_{21} = B_{12}$ und A_{21} sind die sogenannten *Einstein'schen A und B-Koeffizienten*. Die Einheiten der Koeffizienten sind $[B_{21}] = 1 \text{ J}^{-1} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$ und $[A_{21}] = 1 \text{ s}^{-1}$ und ihr Wert ist eine spezifische Eigenschaft des Atoms.

Die zweite wichtige Grösse ist die Energiedichte $\rho(\nu)$ des elektromagnetischen Feldes bei der Frequenz ν :

$$\rho(\nu) = \frac{1}{2} \varepsilon \left| \vec{E}(\nu) \right|^2 \quad (2.46)$$

Hier ist $\vec{E}(\nu)$ die Amplitude des elektrischen Feldes mit Frequenz ν . Da die Anzahl der Photonen proportional zur Lichtintensität ist, gilt:

$$\rho(\nu) \propto N_p, \quad (2.47)$$

wobei N_p die Anzahl der Photonen mit Energie $h\nu$ ist.

2.2.3 Grundprinzip des Lasers

Als Beispiel der kinetischen Gleichungen von Absorption und Emission betrachten wir das Funktionsprinzip eines *Lasers* (Akronym für: Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation). Beim Laser wird künstlich das obere Energieniveau mit Elektronen aufgefüllt, und danach eine Kettenreaktion von stimulierter Emission ausgelöst. Als Resultat erhält man eine grosse Zahl von identischen Photonen innerhalb von sehr kurzer Zeit (Laserblitz).

Eine entscheidende Bedingung für die Kettenreaktion ist die Besetzungsinversion, das heisst, das obere Energieniveau muss mehr Elektronen enthalten als das untere Energieniveau. Diese Bedingung wird auch Laserbedingung genannt.

Beispiel: Dreiniveaulaser

Als Beispiel berechnen wir die Laserbedingung eines Lasers mit drei involvierten Energieniveaus. Die Populationen (Anzahl Elektronen) in den Energieniveaus sind N_1 , N_2 und N_3 . Die kinetischen Gleichungen sind:

$$\frac{\partial N_1}{\partial t} = +\Gamma_B N_p (N_2 - N_1) + \Gamma_A N_2 - R_p N_1 \quad (2.48)$$

$$\frac{\partial N_2}{\partial t} = -\Gamma_B N_p (N_2 - N_1) - \Gamma_A N_2 + \Gamma_{32} N_3 \quad (2.49)$$

$$\frac{\partial N_3}{\partial t} = R_p N_1 - \Gamma_{32} N_3 \quad (2.50)$$

Dabei ist $\Gamma_A = A_{21}$, $\Gamma_B = B_{21}$ und Γ_{32} ist die Rate des (schnellen) strahlungslosen Übergangs vom Niveau 3 ins Niveau 2, und R_p ist die Pumprate. $N_p \propto \rho(\nu)$ ist die Anzahl Photonen, die im Laser zirkulieren.

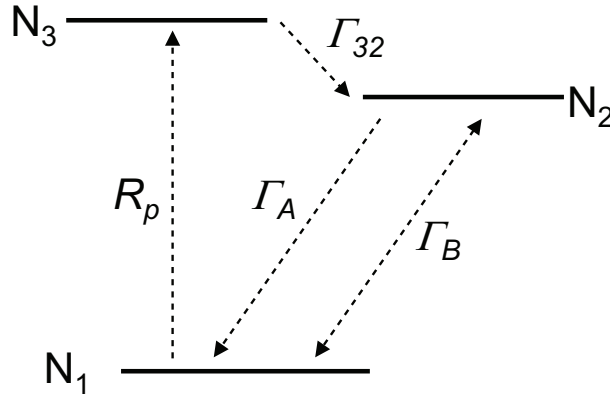


Abbildung 2.4: Dreiniveaulaser

Wir nehmen nun an, dass der Laser im Gleichgewicht ist (für einen kontinuierlichen Laser), und dass die Übergangsrate Γ_{32} sehr schnell ist. Dann gilt:

$$\frac{\partial N_1}{\partial t} = \frac{\partial N_2}{\partial t} = \frac{\partial N_3}{\partial t} = 0 \quad \text{ sowie } N_3 \approx 0 \quad (2.51)$$

Daraus folgt:

$$\frac{\partial N_1}{\partial t} = +\Gamma_B N_p (N_2 - N_1) + \Gamma_A N_2 - R_p N_1 \quad (2.52)$$

$$\frac{\partial N_2}{\partial t} = -\Gamma_B N_p (N_2 - N_1) - \Gamma_A N_2 + R_p N_1 \quad (2.53)$$

Die Differenz der beiden Gleichungen ist:

$$\frac{\partial \Delta N}{\partial t} = -2\Gamma_B N_p \Delta N - \Gamma_A (N + \Delta N) + R_p (N - \Delta N) = 0 \quad (2.54)$$

Hier ist $\Delta N = N_2 - N_1$ die Populationsdifferenz und $N \approx N_2 + N_1$ die Anzahl Atome. Falls die Pumprate R_p schnell genug ist, kann eine *Besetzungsinversion* ($\Delta N > 0$) erreicht werden:

$$\frac{\Delta N}{N} = \frac{R_p - \Gamma_A}{2\Gamma_B N_p + R_p + \Gamma_A} > 0 \quad (2.55)$$

Bei Besetzungsinversion werden insgesamt mehr Photonen emittiert als absorbiert, es wird netto also Licht abgegeben: Laseraktivität tritt ein. Damit Besetzungsinversion eintritt, muss gemäss obiger Gleichung die Pumprate $R_p > \Gamma_A$ schneller als die Rate der spontanen Emission Γ_A sein.

Eigenschaften von Laserlicht

Da die beiden Photonen bei einer stimulierten Emission identisch sind, gilt dies auch für sämtliche Photonen in einem Laser. Das heisst, Laserlicht besitzt Eigenschaften, die normales (diffuses) Licht nicht hat:

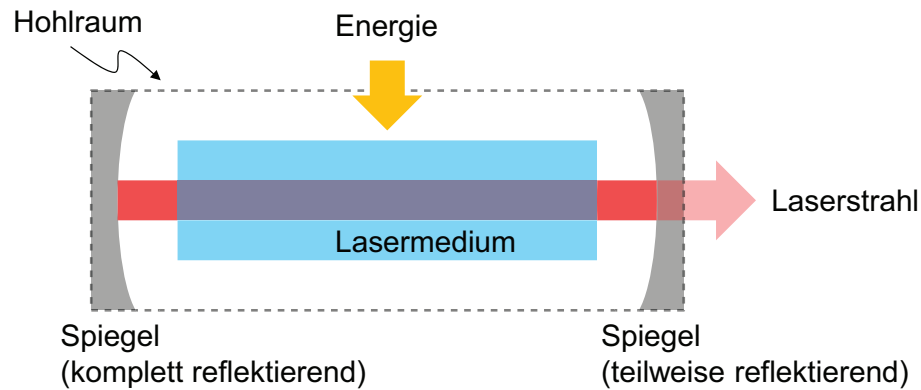


Abbildung 2.5: Aufbau eines Lasers

- Laserlicht ist kohärent: Alle Photonen haben dieselbe Wellenlänge, Frequenz und Phase.
- Laserlicht ist polarisiert: Normalerweise haben alle Photonen dieselbe Polarisation.
- Laserlicht ist in der Regel räumlich gerichtet und hat ein wohldefiniertes, meist gaussförmiges, Intensitätsprofil. Dies ist eine Folge des Laserhohlraums (siehe Abb. 2.5).

2.2.4 Aufbau eines Lasers

Der diskutierte Mechanismus der Besetzungsinversion ist die physikalische Grundlage eines Lasers. Um einen funktionierenden Laser zu erhalten, sind jedoch weitere physikalische und technische Voraussetzungen nötig. Erst diese haben zur weiten Verbreitung von Lasern geführt.

Ein Laser setzt sich aus drei Grundbauteilen zusammen: Einer Energiequelle, einem aktiven Medium, und einem Laserhohlraum (vgl. Abbildungen 2.5 und 2.6).

Pumpmechanismus (Energiequelle)

Der Pumpmechanismus liefert die Energie, welche nötig ist, um das Elektron vom Grundzustand ins Niveau 3 zu bringen. Als Pumpmechanismus kommen viele Methoden in Frage, wie Stöße zwischen Gasmolekülen, Anregung durch Blitzlichtlampen oder andere Laser, eine chemische Reaktion oder elektrische Energie.

Lasermedium (Gain medium)

Das Lasermedium ist das Medium, in welchem die stimulierte Emission stattfindet, wie wir sie stark vereinfacht in Abb. 2.3 beim Zweiniveausystem, und etwas realistischer beim

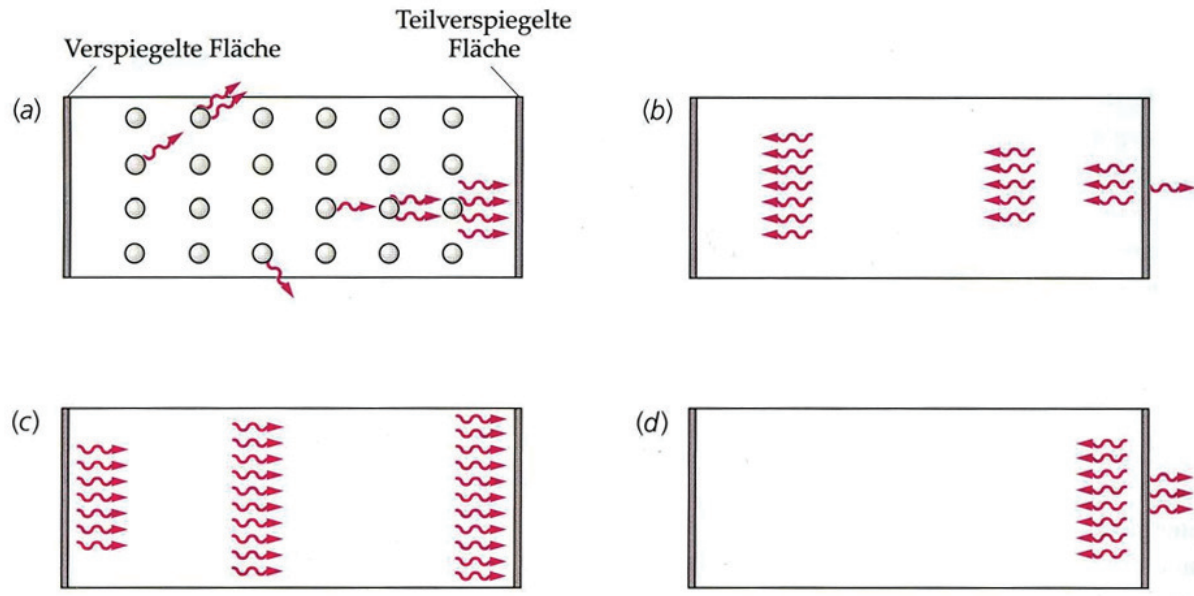


Abbildung 2.6: Laserhohlraum und resonante Verstärkung

Dreinevelaser Abb. 2.4, kennengelernt haben. Kriterien ans Lasermedium sind eine effiziente stimulierte Emission, schwache spontane Emission oder nichtstrahlender Zerfall und die Wellenlänge des erzeugten Lichts. Beispiele sind Gase, Farbstoffe, dotierte Kristalle und Halbleiter.

Der Laserhohlraum (Cavity)

Um die stimulierte Emission zu verstärken, wird Laserlicht häufig in einem resonanten Hohlraum (Lasercavity) generiert [Abb. 2.6(a)]. Die elektromagnetische Welle wird von den Enden des Hohlraums kontinuierlich reflektiert und löst bei jedem Durchgang eine stimulierte Emission aus [Abb. 2.6(b)]. Dadurch steigt die Anzahl Photonen N_p im Hohlraum an und die Anzahl der stimulierten Emissionsprozesse $B_{21}N_p$ nimmt zu [Abb. 2.6(c)].

Der Laserhohlraum hat eine weitere Funktion. Da die elektromagnetische Welle kontinuierlich reflektiert wird, entspricht sie einer stehenden Welle. Die Länge des Laserhohlraums muss deshalb exakt ein Vielfaches der halben Wellenlänge sein. Einerseits kann damit die Wellenlänge zusätzlich stabilisiert werden. Andererseits hat der austretende Laserstrahl [Abb. 2.6(d)] ein genau definiertes Intensitätsprofil, welches durch die dreidimensionale stehende Welle bestimmt ist.

Name	Pump- und Lasermedium
Gaslaser	Zwei Gase: Ein Gas dient als Pumpmedium, das andere als Lasermedium
Feststofflaser	Ähnlich wie Gaslaser, aber das Pump- und Lasermedium sind Feststoffe
Dye-Laser	Organische Moleküle dienen als Pump- und Lasermedium
Faserlaser	Feststofflaser in einer Glasfaser, wobei die Faser als Lasercavity dient
Chemische Laser	Populationsinversion wird durch kontinuierliche chemische Reaktionen aufrechterhalten
Halbleiterlaser (Diodenlaser)	Halbleiterdiode, die in einer Lasercavity eingebettet ist. Die Diode wird elektrisch angeregt (siehe Kapitel 3.3.4)
Free Electron Laser (FEL)	Freie Elektronen, im Teilchenbeschleuniger auf relativistische Energien beschleunigt, dienen gleichzeitig als Pump- und Lasermedium
MASER	Analog zu Laseremission im Mikrowellenbereich

Tabelle 2.3: Verschiedene Lasertypen

Beispiele von Lasertypen

Laser unterscheiden sich in ihrer Art und Weise, wie das obere Niveau „gepumpt“ und so eine Populationsinversion erreicht wird. Tabelle 2.3 fasst die wichtigsten Lasertypen zusammen.

Experiment: Stickstoff-Laser

Experiment: Laser-Rohre

Kapitel 3

Festkörperphysik

3.1 Festkörper

Literatur: Tipler Kap. 38, Tipler/Llewellyn Kap. 10

In den nächsten vier Kapiteln werden wir verschiedene Typen von Festkörpern betrachten. Dabei werden wir uns hauptsächlich auf ihre elektronischen Eigenschaften konzentrieren. Was macht ein Material zu einem Leiter, Isolator, Halbleiter oder Supraleiter? Was beeinflusst die elektrische Leitfähigkeit? Dazu werden wir das Bändermodell benutzen, welches die Verallgemeinerung von Energieniveaus auf Festkörper ist. Zusätzlich werden wir die Physik einer Reihe wichtiger elektronischer Bauteile betrachten, wie Dioden und Transistoren.

Der Aufbau von Festkörpern, wie z.B. die chemische Bindung oder Kristallgitter, werden hier nicht besprochen. (Eine Übersicht dazu ist z.B. in *Tipler, Kapitel 38.1*, gegeben.)

3.1.1 Bändermodell

Vom Atom zum Festkörper

Bisher haben wir die Energieniveaus von einzelnen Atomen, oder in bestimmten abstrakten Modellen (wie z.B. dem Teilchen im Kasten) betrachtet. Wie lässt sich dies auf einen Festkörper mit Millionen von Atomen verallgemeinern? Offensichtlich ist die Wellengleichung niemals exakt lösbar. Deshalb werden wir betrachten was geschieht, wenn wir anfangs isolierte Atome einander annähern:

- Die Energieniveaus in einem einzelnen Atom liegen weit auseinander. Wir können deshalb erwarten, dass die Reihenfolge der Energieniveaus in etwa erhalten bleibt.
- In grosser Entfernung sind die Energieniveaus von zwei gleichen Atomen identisch.

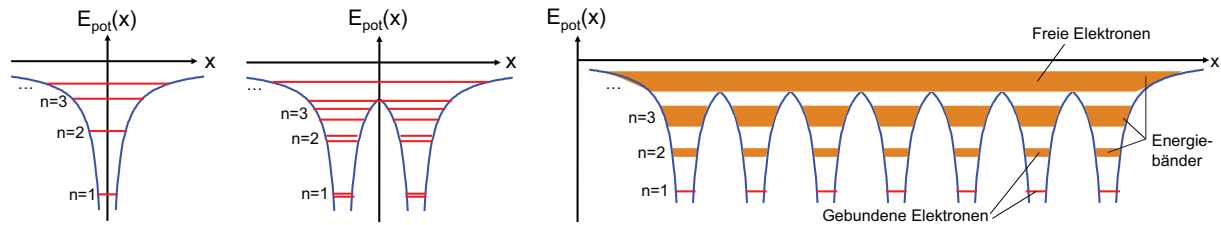


Abbildung 3.1: (Links) 1 Atom (Mitte) 2 Atome (Molekül) (Rechts) N Atome (Festkörper)

- Nähern sich zwei Atome an, so werden sich die entsprechenden Energieniveaus unter dem gegenseitigen Einfluss geringfügig verschieben. Im resultierenden zwei-Atom System erscheinen nun die beiden ursprünglich identischen Energieniveaus als zwei neue Niveaus mit leicht unterschiedlicher Energie (das einen Niveau etwas höher, das andere etwas tiefer als die Originalniveaus).
- Nähern sich N Atome an, so spaltet sich ein gegebenes atomares Energieniveau in N leicht unterschiedliche Niveaus auf. Wenn die Anzahl Atome sehr gross ist, ergibt sich daraus eine kontinuierliche Verteilung von Energieniveaus, *Energieband* genannt.
- Zu jedem atomaren Energieniveau gibt es ein Energieband. Je höher das ursprüngliche Energieniveau, desto breiter ist in der Regel der Bereich des Energiebandes.

Dieses Modell wird das *Bändermodell* für Festkörper genannt, und die Anordnung der Energiebänder (das Analogon zum Energieniveaudiagramm) heisst *Bandstruktur*, siehe Abb. 3.1.

Gebundene und Freie Elektronen

Aus obiger Überlegung sieht man, dass es zwei Extremfälle von Energiebändern geben wird:

- Energiebänder, welche aus tiefen Energieniveaus gebildet werden, haben nur eine sehr geringe Aufspaltung. Das heisst, Elektronen in diesen Niveaus sind fast vollständig an dem ursprünglichen Atom lokalisiert und spüren fast nichts von den andern Atomen. Diese Elektronen werden als *gebundene Elektronen* (core electrons) bezeichnet.
- Energiebänder aus hohen Energieniveaus sind breit. Die Elektronen können sich fast frei über den gesamten Festkörper bewegen, da die Kernladung durch die gebundenen Elektronen fast vollständig abgeschirmt wird. Diese Elektronen werden als *freie Elektronen* oder *Valenzelektronen* bezeichnet.

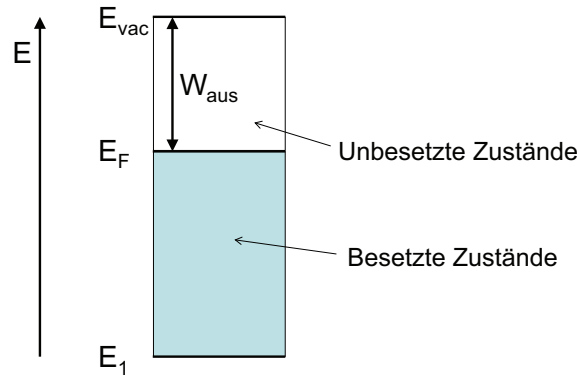


Abbildung 3.2: Energieniveaudiagramm eines Festkörpers

Wie wir im Folgenden sehen werden, sind die Valenzelektronen entscheidend für das elektrische Verhalten eines Materials, während die gebundenen Elektronen meist vernachlässigt werden können.

3.1.2 Fermienergie

Im Festkörper sind, wie im Atom, alle Energiebänder in Reihenfolge aufsteigender Energien besetzt. Hat ein Festkörper M Elektronen, so sind die untersten $M/2$ Niveaus besetzt, da jedes Energieniveau nach Pauliprinzip genau zwei Elektronen aufnehmen kann. Die Energie des höchsten besetzten Niveaus heisst Fermienergie E_F :

Die Fermienergie E_F ist die Energie des höchsten besetzten Energieniveaus, relativ zum tiefsten besetzten Niveau E_1 .

Die Differenz zwischen der Fermienergie und der Energie eines freien Elektrons ausserhalb des Festkörpers (Vakuumniveau E_{vac}), ist die Austrittsarbeit W_{aus} , welche wir bereits beim Photoeffekt in Kapitel 1.1.1 angetroffen haben. Die Energieniveaus sind in der Abbildung 3.2 dargestellt.

Die genaue Bandstruktur und Fermienergie kann man nur näherungsweise und numerisch berechnen. Einige grundlegende Eigenschaften sieht man jedoch schon, wenn man annimmt, dass sich die Valenzelektronen wie freie Elektronen in einem dreidimensionalen Kastenpotential (gegeben durch die Dimension des Festkörpers) verhalten. Als Beispiel werden wir deshalb im Folgenden die Energieniveaus und Fermienergie eines eindimensionalen und eines dreidimensionalen Kastenpotentials berechnen.

Beispiel: Fermienergie eines eindimensionalen Kastenpotentials

Die Energieniveaus für ein Teilchen im Kastenpotential sind (siehe Kapitel 1.3.3, bzw. 1.3.4 Gleichung 1.68):

$$E_N = \frac{h^2 N^2}{8m_e L_x^2} \quad \text{mit } N = 1, 2, 3, \dots \quad (3.1)$$

(Achtung: Wir verwenden N statt n für die Quantenzahl, um eine Verwechslung mit der Teilchendichte n weiter unten zu vermeiden.) Hier ist L_x die Breite des Kastenpotentials und m_e die Masse des Elektrons. Wir wollen nun M Elektronen in den Kasten einfüllen und bestimmen, bis zu welcher Energie die Niveaus aufgefüllt werden. Da jedes Energieniveau mit zwei Elektronen besetzt werden kann, ist $N = M/2$ und das höchste besetzte Energieniveau ist:

$$\boxed{E_F = \frac{h^2 (M/2)^2}{8m_e L_x^2} = \frac{h^2 M^2}{32m_e L_x^2} = \frac{h^2 n_x^2}{32m_e}} \quad \begin{array}{l} \text{Fermienergie des} \\ \text{1D Kastenpotentials} \end{array} \quad (3.2)$$

Hier ist $n_x = M/L_x$ die *eindimensionale Teilchendichte* (Anzahl freie Elektronen pro Längeneinheit).

Beispiel: Fermienergie eines dreidimensionalen Kastenpotentials

Als zweites Beispiel berechnen wir die Fermienergie eines dreidimensionalen Kastenpotentials. Die Energieniveaus für ein Teilchen in einem dreidimensionalen Kastenpotential sind (siehe z.B. *Tipler/Mosca, Kapitel 35.5* oder *Tipler/Llewellyn, Kapitel 7.1*):

$$E_{N_x, N_y, N_z} = \frac{h^2}{8m_e} \left(\frac{N_x^2}{L_x^2} + \frac{N_y^2}{L_y^2} + \frac{N_z^2}{L_z^2} \right) \quad \text{mit } N_x, N_y, N_z = 1, 2, 3, \dots \quad (3.3)$$

Wir nehmen der Einfachheit halber an, dass die Seitenlängen gleich sind ($L_x = L_y = L_z = L$):

$$E_{N_x, N_y, N_z} = \frac{h^2}{8m_e L^2} (N_x^2 + N_y^2 + N_z^2) = \frac{h^2}{8m_e L^2} N_{tot}^2 \quad (3.4)$$

Die Frage ist nun, wieviele Kombinationen von N_x, N_y, N_z möglich sind, ohne dass ein gewählter Maximalwert von N_{tot}^2 überschritten wird. Man kann zeigen, dass dies (für genügend grosse N_x, N_y, N_z) genau 1/8 des Volumens einer Kugel mit Radius N_{tot} ist. Die Anzahl möglicher Kombinationen ist gleich N :

$$N \approx \frac{1}{8} \frac{4\pi}{3} N_{tot}^3 = \frac{1}{8} \frac{4\pi}{3} (N_x^2 + N_y^2 + N_z^2)^{3/2} \quad \text{und} \quad (3.5)$$

$$N_x^2 + N_y^2 + N_z^2 = \left(\frac{24N}{4\pi} \right)^{2/3} \quad (3.6)$$

Die Energie ist also:

$$E_N = \frac{h^2}{8m_e L^2} (N_x^2 + N_y^2 + N_z^2) = \frac{h^2}{8m_e} \left(\frac{6N}{\pi L^3} \right)^{2/3} \quad (3.7)$$

Die Fermienergie E_F ist bestimmt durch $N = M/2$:

$$\boxed{E_F = \frac{h^2}{8m_e} \left(\frac{3M}{\pi L^3} \right)^{2/3} = \frac{h^2}{8m_e} \left(\frac{3n}{\pi} \right)^{2/3}} \quad \text{Fermienergie des 3D Kastenpotentials} \quad (3.8)$$

Hier ist $n = M/L^3$ die *dreidimensionale Teilchendichte* (Anzahl freie Elektronen pro Volumeneinheit).

Hinweis: Die Fermienergie ist in diesem Beispiel auf das tiefste Niveau des Kastenpotentials bezogen. In einem realen Festkörper ist die Fermienergie auf den Grundzustand bezogen.

3.1.3 Fermi-Dirac Verteilung

Besetzungswahrscheinlichkeit

Gemäss dem Pauliprinzip sind alle Energieniveaus mit Energie $E < E_F$ mit Elektronen besetzt, und alle Energieniveaus mit Energie $E > E_F$ leer. Dies entspricht einer *Besetzungswahrscheinlichkeit* $f(E)$:

$$f(E) = \begin{cases} 1 & \text{falls } E \leq E_F \\ 0 & \text{falls } E > E_F \end{cases} \quad (3.9)$$

Dieses Bild stimmt nur bei Temperatur $T = 0$. Bei endlichen Temperaturen $T > 0$ werden die Elektronen thermisch angeregt, sodass es immer Elektronen gibt, die eine etwas höhere Energie als E_F besitzen, während andere etwas weniger als E_F haben. Die Besetzungswahrscheinlichkeit hat also einen Übergangsbereich, bei welchem $f(E)$ zwischen 1 und 0 liegt. Da die thermische Energie im Mittel ungefähr $k_B T$ ist (k_B ist die Boltzmannkonstante), hat der Übergangsbereich eine Breite von $\approx 2k_B T$.

Die Besetzungswahrscheinlichkeit für Temperaturen $T > 0$ kann exakt angegeben werden, und wird Fermi-Dirac-Verteilung (Abb. 3.3) genannt:

$$\boxed{f(E) = \frac{1}{1 + e^{\frac{E - E_F}{k_B T}}}} \quad \text{Fermi-Dirac Verteilung} \quad (3.10)$$

Der Faktor $f(E)$ heisst auch *Fermifaktor*.

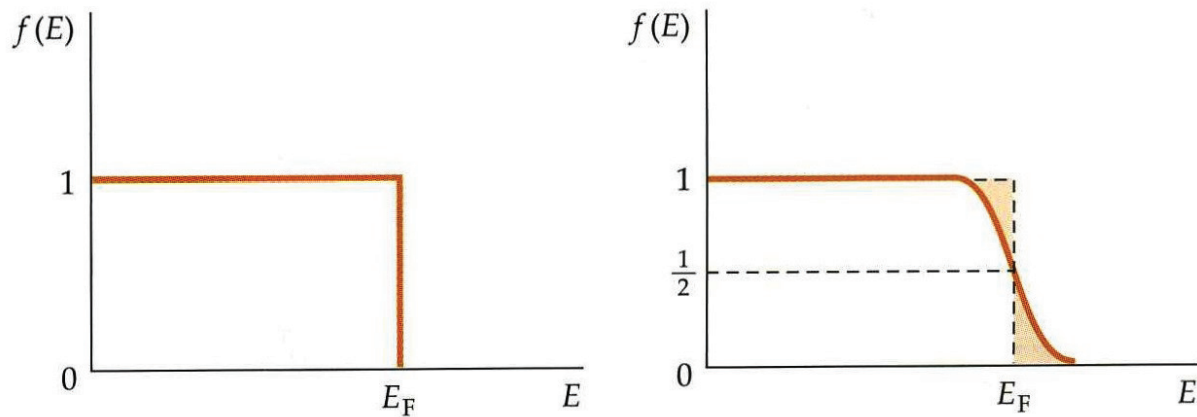


Abbildung 3.3: (Links) Besetzungswahrscheinlichkeit bei $T = 0$. (Rechts) Besetzungswahrscheinlichkeit bei $T > 0$

Ferminiveau

Für endliche Temperaturen ist die Fermienergie nicht mehr genau definiert. Da die Elektronen nun zusätzliche thermische Bewegungsenergie haben, hat das schnellste Elektron eine Energie höher als E_F und ist nicht zeitlich konstant. Deshalb benötigt man eine allgemeinere Definition:

Die Fermienergie ist diejenige Energie E , bei welcher die Besetzungswahrscheinlichkeit nach Fermi-Dirac $f(E) = 0.5$ ist.

Um von der ersten Definition (Kapitel 3.1.2) abzugrenzen, wird hier meist von *Ferminiveau* (und nicht der Fermienergie) gesprochen.

Fermitemperatur und Fermigeschwindigkeit

Die Fermienergie entspricht der kinetischen Energie der Elektronen, die sich auf dem höchsten besetzten Energieniveau befinden. Aus der Fermienergie kann man zwei weitere Größen definieren:

$$\boxed{T_F = \frac{E_F}{k_B}} \quad \text{Fermitemperatur} \quad (3.11)$$

Die Fermitemperatur gibt an, ab welcher Temperatur die Elektronen thermisch so stark angeregt werden, dass das Pauliprinzip keine grosse Rolle mehr spielt. Man kann zeigen, dass die Fermi-Dirac Verteilung für hohe Temperaturen ($T > T_F$) in die Boltzmannver-

teilung übergeht. Die Fermigeschwindigkeit v_F lässt sich schreiben als:

$$\boxed{v_F = \sqrt{\frac{2E_F}{m_e}}} \quad \text{Fermigeschwindigkeit} \quad (3.12)$$

wiederum gibt die kinetische Energie der Leitungselektronen an. Die Fermigeschwindigkeit spielt eine Rolle beim Betrachten der elektrischen Leitfähigkeit, da sie die Häufigkeit von Zusammenstößen zwischen Elektronen und Gitteratomen beeinflusst.

3.1.4 Leiter, Halbleiter und Isolatoren

Anhand der Bandstruktur und der Lage der Fermienergie kann man für ein Material vorhersagen, ob es einen elektrischen Strom grundsätzlich leiten kann (Leiter) oder nicht (Isolator). (Hinweis: Wir betrachten momentan nicht, *wie gut* ein Leiter einen Strom leiten kann, sondern nur, ob es überhaupt möglich ist. Die elektrische Leitfähigkeit von Leitern wird in Kapitel 3.2 genauer besprochen.)

Bedingung für elektrisches Leitvermögen

Um die Leitfähigkeit zu beurteilen, betrachten wir, was geschieht, wenn ein elektrisches Feld angelegt wird. Bei einem Leiter werden die Elektronen beschleunigt, nehmen also zusätzliche Bewegungsenergie auf. Dadurch verändert sich die Besetzungswahrscheinlichkeit, wie in der Abbildung 3.4 dargestellt:

- Die kinetische Energie in positiver Bewegungsrichtung nimmt zu, während sie in negativer Bewegungsrichtung abnimmt. Die Besetzungswahrscheinlichkeit verschiebt sich nach rechts.
- Damit Zustände mit höherer Energie besetzt werden können, muss der Zustand frei sein. Ein schon besetzter Zustand kann keine Elektronen mehr aufnehmen (Pauliprinzip).

Daraus ziehen wir zwei wichtige Schlussfolgerungen:

- Nur die Elektronen mit Energie $E \approx E_F$ tragen zum Stromfluss bei. Elektronen mit tieferer Energie finden keine freien Energieniveaus vor.
- Falls das Energieband zufälligerweise gerade voll ist (und sich nicht mit einem anderen Band überschneidet), gibt es keine freien Zustände, und es kann kein Stromfluss stattfinden.

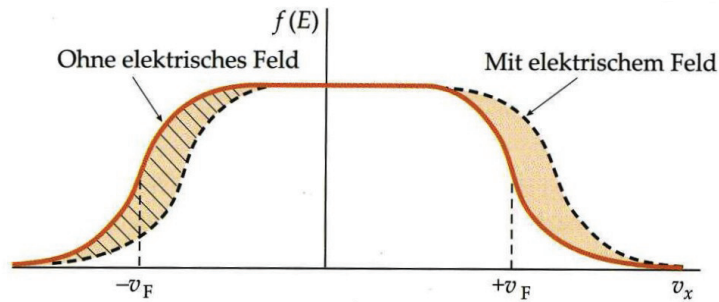


Abbildung 3.4: Fermiverteilung im elektrischen Feld

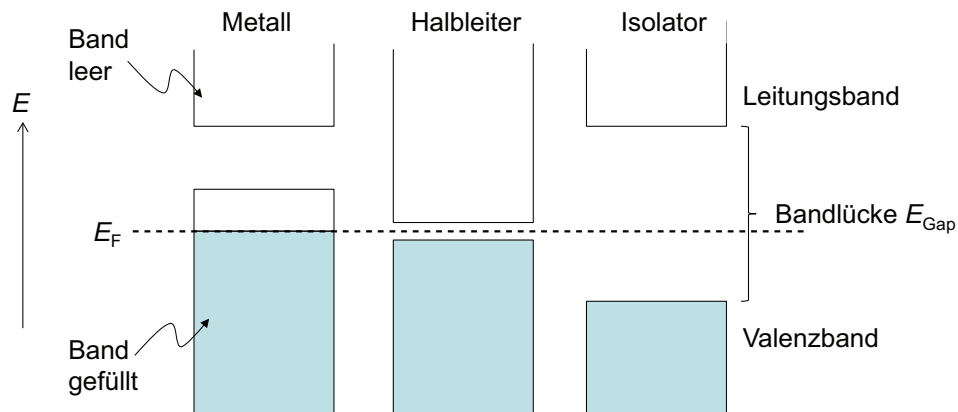


Abbildung 3.5: Schematische Darstellung der Besetzung erlaubter Energiebänder durch Elektronen für verschiedene Leitertypen

Bandlücke

Je nachdem, wo die Fermienergie liegt, zeigt ein Festkörper deshalb leitendes oder nicht-leitendes Verhalten (siehe Abbildung 3.5):

- (a) Metall ($E_{Gap} = 0$): Die Fermienergie liegt in einem Band und die Elektronen können deshalb kinetische Energie aufnehmen oder abgeben.
- (b) Halbleiter ($0 \text{ eV} < E_{Gap} < 4 \text{ eV}$): Das Material besitzt eine Bandlücke und die Fermienergie liegt zwischen zwei Bändern, aber die Energiedifferenz zwischen den beiden Bändern ist klein genug, dass Elektronen thermisch vom Valenz- ins Leitungsband angeregt werden können.
- (c) Isolator ($E_{Gap} > 4 \text{ eV}$): Die Fermienergie liegt zwischen zwei Bändern, und die Energiedifferenz zwischen den beiden Bändern ist so gross, dass keine Elektronen ins Leitungsband angeregt werden und die Besetzungswahrscheinlichkeit im Leitungsband gleich null ist.

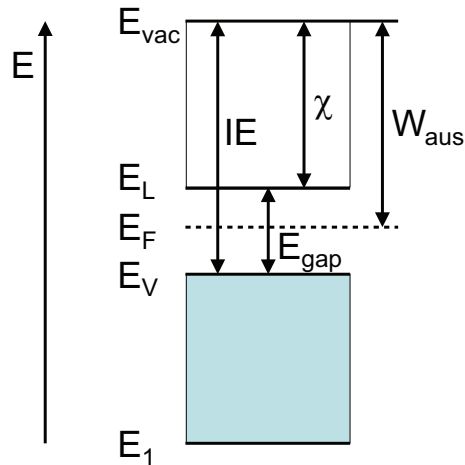


Abbildung 3.6: Energieniveaudiagramm mit Bandlücke

Beispiel: Besetzungswahrscheinlichkeit für Kupfer, Silizium und Quartz bei 300K

- Cu: $E_{Gap} = 0 \text{ eV}$, $f(E) = 0.5$
- Si: $E_{Gap} = 1.1 \text{ eV}$, $f(E) = 10^{-11}$
- SiO₂: $E_{Gap} = 9 \text{ eV}$, $f(E) = 10^{-76}$
- $k_B T$: $E = 0.026 \text{ eV}$

Abbildung 3.6 zeigt das Energieniveaudiagramm eines Festkörpers, bei welchem die Fermienergie in der Bandlücke liegt. Dabei sind IE die Ionisierungsenergie und χ die Elektronenaffinität:

Die Ionisierungsenergie IE ist gleich der Energie, welche benötigt wird, um das oberste Elektron eines Atoms/Festkörpers zu entfernen, d.h. ins Vakuum zu überführen.

Die Elektronenaffinität χ ist gleich der Energie, welche benötigt wird, um das oberste Elektron eines einfach negativ geladenen Atoms/Festkörpers zu entfernen.

Im Fall eines Metalls (ohne Bandlücke) gilt $IE = \chi = W_{aus}$. Bei einem Festkörper mit Bandlücke unterscheiden sie sich jedoch um die Bandlücke, $IE = \chi + E_{Gap}$.

Experiment: Elektrische Leitfähigkeit NTC

Experiment: Elektrische Leitfähigkeit PTC

Experiment: Leitfähigkeit von Platin

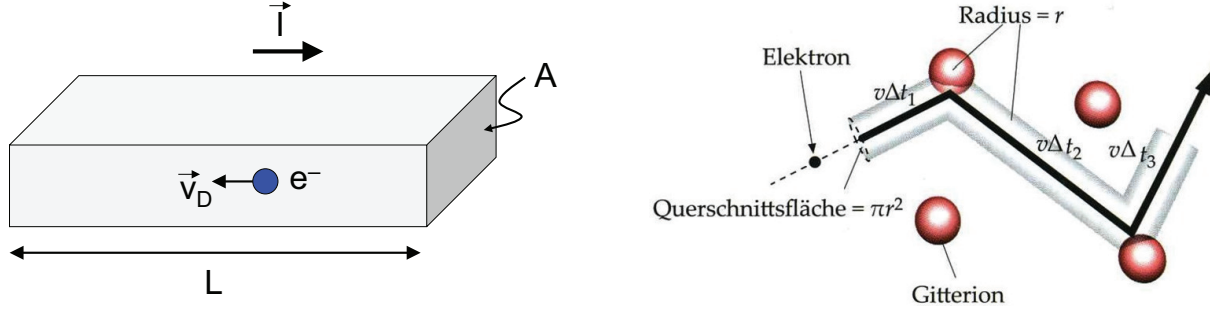


Abbildung 3.7: (Links) Leitfähigkeit und Widerstand. (Rechts) Drude-Modell

3.2 Elektronische Leitfähigkeit von Festkörpern

Literatur: Tipler Kap. 38, Tipler/Llewellyn Kap. 10

Im letzten Kapitel haben wir gesehen, wie man anhand des Bändermodells und der Lage der Fermienergie voraussagen kann, ob ein Material leitend oder isolierend ist. In diesem Kapitel wollen wir nun die Leitfähigkeit von leitenden Materialien genauer betrachten. Als wichtigstes Resultat werden wir finden, dass die Leitfähigkeit von Metallen mit sinkender Temperatur zunimmt.

3.2.1 Drude-Modell

Die spezifische Leitfähigkeit eines Materials ist gegeben durch (siehe Physik 1, Kapitel 2.4.2):

$$\sigma = \frac{|\vec{v}_D|en_e}{|\vec{E}|} \quad (3.13)$$

Hier ist n_e die Ladungsträgerdichte, \vec{E} das elektrische Feld, und \vec{v}_D die Driftgeschwindigkeit (siehe Abb. 3.7, links).

Die entscheidende Grösse ist hier die Driftgeschwindigkeit. Die Driftgeschwindigkeit ist die stationäre Endgeschwindigkeit, welche sich einstellt, nachdem das elektrische Feld angelegt wurde. Wir werden im Folgenden versuchen, die Driftgeschwindigkeit aus der Häufigkeit von Zusammenstößen mit Gitterionen abzuschätzen. Dieses Modell wird Drude-Modell genannt.

Dazu nehmen wir an, dass das Elektron nach jedem Zusammenstoß inelastisch in eine beliebige Richtung abgelenkt (gestreut) wird, und dass die mittlere Zeit zwischen zwei Zusammenstößen $\tau = \langle t \rangle$ unabhängig vom elektrischen Feld ist (siehe Abb. 3.7, rechts).

Die Geschwindigkeit eines Elektrons direkt nach einem Stoß sei \vec{v}_0 . Die Geschwindigkeit zu einer Zeit τ nach dem Stoß ist dann:

$$\vec{v} = \vec{v}_0 + \vec{v}_D = \vec{v}_0 - \frac{e}{m_e} \vec{E} \tau \quad (3.14)$$

Wie wir sehen werden, ist $|\vec{v}_0|$ viel grösser als $|\vec{v}_D|$. (Deshalb ist die Zeit zwischen zwei Zusammenstößen unabhängig von \vec{v}_D). Während der Zeit τ legt das Elektron deshalb eine mittlere Strecke λ , genannt die mittlere freie Weglänge, zurück:

$$\boxed{\lambda = \langle |\vec{v}| \rangle \tau \approx \langle |\vec{v}_0| \rangle \tau} \quad \text{mittlere freie Weglänge} \quad (3.15)$$

Wie wir im letzten Kapitel gesehen haben, tragen nur die Elektronen in der Nähe des Fermi-niveaus zum elektrischen Stromfluss bei. Die mittlere Geschwindigkeit ist also gegeben durch die Fermigeschwindigkeit:

$$\langle |\vec{v}_0| \rangle = \vec{v}_F \quad (3.16)$$

Die Ladungsträgerdichte n_e ist ebenfalls nur durch die Anzahl Zustände im Bereich des Fermi-niveaus bestimmt. Anhand dem Modell der freien Elektronen kann man zeigen, dass:

$$n_e \propto g(E_F) = \left. \frac{\partial n}{\partial E} \right|_{E_F} \quad (3.17)$$

Dabei ist $g(E_F)$ die Anzahl Zustände, welche sich im Energieintervall $[E_F, E_F + dE]$ befinden. $g(E_F)$ gibt wieder, ob sich im Bereich der Fermienergie überhaupt Zustände befinden, welche zur elektrischen Leitung beitragen können. $g(E_F)$ wird *Zustandsdichte* genannt.

Zusammengefasst ist nun die spezifische Leitfähigkeit gegeben durch:

$$\boxed{\sigma = \frac{e^2 \tau n_e}{m_e} = \frac{e^2 \lambda n_e}{m_e v_F} \propto \frac{e^2 \lambda g(E_F)}{m_e v_F}} \quad \text{spezifische Leitfähigkeit nach Drude} \quad (3.18)$$

3.2.2 Streuung von Leitungselektronen

Die entscheidende Grösse ist nun die mittlere freie Weglänge, oder anders gesagt, wie oft ein Elektron mit einem Gitterion zusammenstösst. Dazu benötigen wir einige fundamentale Überlegungen:

- Erinnern wir uns daran, dass Elektronen durch eine stehende Welle im Metallgitter repräsentiert sind. Da sich Wellen ohne Energieverlust ausbreiten, findet in einem idealen Metallgitter *keine Streuung und kein Energieverlust* statt. Ein ideales Metall sollte deshalb eine *unendliche Leitfähigkeit* aufweisen.

Dies entspricht jedoch nicht unserer Erfahrung. Streuung tritt also trotzdem auf, und zwar aus zwei Gründen:

- Gitterschwingungen: Die Ionen verlassen ihren Gitterplatz. Nun ist das Potential zeitabhängig, und ein zeitabhängiges Potential kann zu Energieverlust führen. Die Elektronen können Energie an Gitterschwingungen abgeben oder aufnehmen.

- Störstellen: Das Gitter weist Fremdatome oder Bruchstellen auf. Diese sind im regelmässigen Gitter nicht berücksichtigt und können Elektronen unter Energieaufnahme oder -abgabe streuen.

Wir berechnen nun die mittlere freie Weglänge für beide Streuprozesse.

Streuung durch Gitterschwingungen

Die mittlere freie Weglänge kann man abschätzen, indem man das Volumen, das vom Elektron durchwandert wird vergleicht mit dem Volumen, das pro Ion zur Verfügung steht (siehe Abb. 3.7, rechts):

$$\lambda_{osc} = \frac{V_{ion}}{A_{ion}} = \frac{1}{n_{ion}A_{ion}} \quad (3.19)$$

Hier ist n_{ion} die Anzahl Ionen pro m^3 (Ionendichte). A_{ion} bezeichnet man als Streuquerschnitt des Ions. Der Streuquerschnitt ist gegeben durch die mittlere Auslenkung des Ions, wenn es eine Schwingung um die Gleichgewichtslage ausführt:

$$A_{ion} = \pi x_0^2 = \pi \frac{k_B T}{k_c} = \frac{\pi k_B T}{m_{ion} \omega_0^2} \quad (3.20)$$

Hier ist x_0 die Schwingungsamplitude, k_c die Federkonstante der Gitterschwingung, m_{ion} ist die Masse des Ions und ω_0 ist die Schwingungsfrequenz. Die mittlere freie Weglänge ist also:

$$\lambda_{osc} = \frac{m_{ion} \omega_0^2}{n_{ion} \pi k_B T} \quad (3.21)$$

Streuung durch Fehlstellen

Befinden sich Fremdatome im Metallgitter, so können diese ebenfalls Elektronen unter Energieaufnahme oder -abgabe streuen. Die mittlere freie Weglänge ist:

$$\lambda_{SS} = \frac{1}{n_{SS} A_{SS}} = \frac{1}{n_{SS} \pi r_{SS}^2} \quad (3.22)$$

Hier ist $n_{SS} \ll n_{ion}$ die Dichte an Störstellen, und $A_{SS} = \pi r_{SS}^2$ ist der Streuquerschnitt des Fremdatoms mit Radius r_{SS} .

Falls ein Metall sowohl Gitterschwingungen wie Fremdatome aufweist (der Normalfall), so ist die mittlere freie Weglänge durch beide Streumechanismen bestimmt. Man findet, dass die kombinierte mittlere freie Weglänge gegeben ist durch (Matthiessen's Regel resp. Addition von Widerständen):

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{1}{\lambda_{osc}} + \frac{1}{\lambda_{SS}} \quad (3.23)$$

Leitfähigkeit nach dem Bändermodell

Die obigen Abschätzungen kann man zusammenfassen, und damit einen detaillierten Ausdruck für die Leitfähigkeit nach dem Bändermodell geben:

$$\sigma = \frac{e^2 n_e}{m_e v_F} \left(\frac{n_{ion} \pi k_B T}{m_{ion} \omega_0^2} + n_{SS} \pi r_{SS}^2 \right)^{-1} \quad \begin{array}{l} \text{spezifische Leitfähigkeit} \\ \text{nach dem Bändermodell} \end{array} \quad (3.24)$$

Das Bändermodell macht viele (richtige) Voraussagen zur elektrischen Leitfähigkeit:

- σ ist unabhängig vom elektrischen Feld (Ohm'sches Gesetz)
- σ ist proportional zur Zustandsdichte $g(E_F) \propto n_e$ und gibt also wieder, ob ein Material leitend oder nichtleitend ist
- σ ist für hohe Temperaturen proportional zu $1/T$ (wenn Gitterschwingungen der dominierende Mechanismus sind)
- σ ist für tiefe Temperaturen temperaturunabhängig (wenn Störstellen der dominierende Mechanismus sind)
- σ ist für tiefe Temperaturen abhängig von der Konzentration der Störstellen

3.3 Halbleiter

Literatur: Tipler Kap. 38.6,38.7, Tipler/Llewellyn Kap. 10.7,10.8

Halbleiter gehören aufgrund ihrer enormen wirtschaftlichen Bedeutung (Mikroelektronik) zu den wichtigsten Materialien der heutigen Informationsgesellschaft. Sie sind durch eine Bandlücke von etwa 1 eV charakterisiert, gehören also strikt genommen zu den Isolatoren. Durch Dotierung (siehe nächster Abschnitt) oder den Feldeffekt, können jedoch freie Ladungsträger erzeugt und so die Leitfähigkeit eines Halbleiters über Größenordnungen verändert werden.

Kontaktstellen zwischen zwei Halbleitern können sehr interessante elektrische Eigenschaften haben. Ein Grossteil der industriellen Halbleiterelektronik beruht auf solchen Kontaktstellen (Halbleiterübergängen). Die zwei wichtigsten Bauteile sind die Diode und der Transistor.

3.3.1 Dotierung von Halbleitern

Halbleitern kann man gezielt Fremdatome einpflanzen, um positive oder negative Ladungen einzuführen. Dazu verwendet man normalerweise Elemente, die im Periodensystem eine Kolonne rechts oder links vom Halbleiterelement liegen. Das bekannteste Beispiel ist die Dotierung von Silizium (Si) mit Gallium (Ga) oder Arsen (As), wie in Abbildung 3.8 dargestellt.

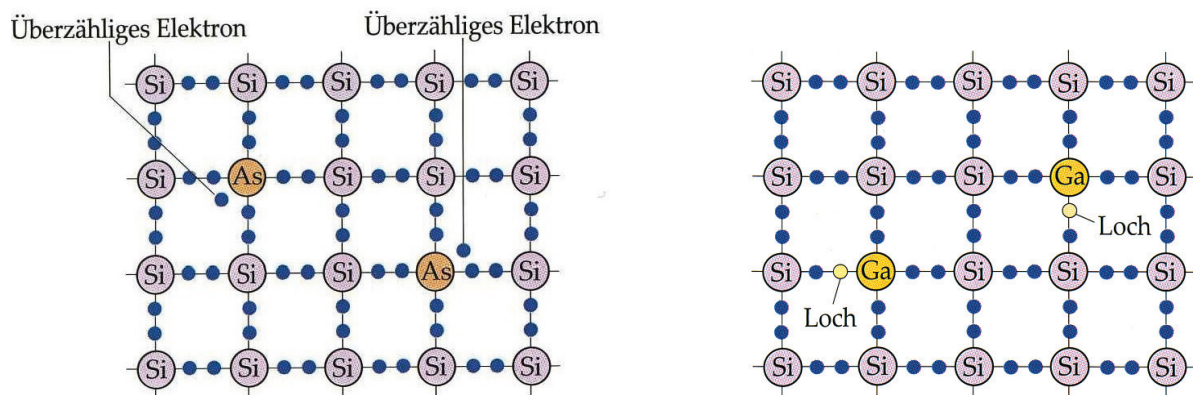


Abbildung 3.8: (Links): n-Dotierung von Si mit As (Si:As). (Rechts): p-Dotierung von Si mit Ga (Si:Ga)

Donator

Falls das Fremdatom ein Elektron mehr hat (Beispiel: As in Si, wie in Abb. 3.8 links), gibt das Fremdatom das Elektron ab und es wird zu einem Leitungselektron. Dies wird auch

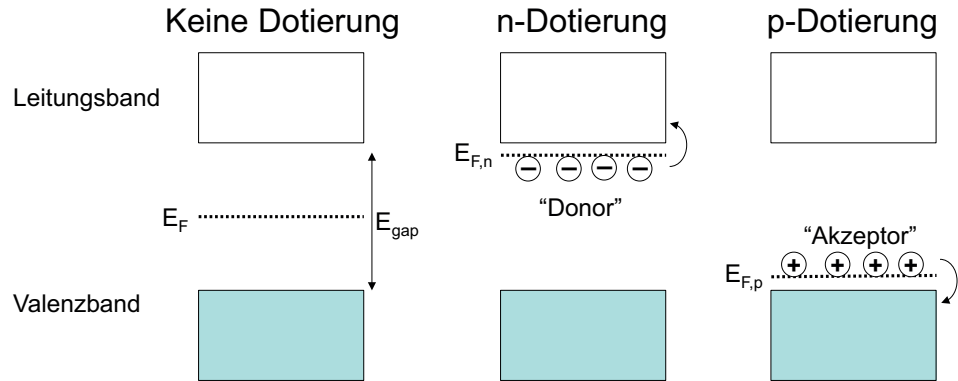


Abbildung 3.9: Bandstruktur von dotierten Halbleitern

„electron doping“ oder n-doping (negative doping) genannt. Eine Skizze zur Bandstruktur ist in Abbildung 3.9 zu sehen. Im gezeigten Fall ist das Elektron an das Donatoratom (As) gebunden, kann jedoch z.B. durch thermische Anregung (Pfeil) in ein freies Elektron im Leitungsband überführt werden.

Akzeptor

Falls das Fremdatom ein Elektron weniger hat (Beispiel: Ga in Si, wie in Abb. 3.8 rechts), nimmt das Fremdatom ein Elektron auf und hinterlässt ein mobiles „Loch“. Dies wird auch „hole doping“ oder p-doping (positive doping) genannt.

Die Energie zur Abgabe des Elektrons oder Lochs ist normalerweise viel kleiner als die Energie der Bandlücke. Damit kann man Materialien (wie intrinsische Halbleiter), die eigentlich nur bei sehr hoher Temperatur leitfähig wären ($k_B T \sim E_{Gap}$), halbleitend machen. Somit kann man sich eine technisch verwendbare Leitfähigkeit und einen brauchbaren Temperaturbereich für Anwendungen (wie z.B. eine Diode, siehe Abschnitt 3.3.4) schaffen. Siehe auch Abb. 3.9 zur Bandstruktur.

Experiment: Elektronen einspritzen

Experiment: Springendes Elektron, n- und p-Leitung

Experiment: Elektrische Leitfähigkeit NTC

Beispiel: E_{Gap} und Lage der Donator/Akzeptorniveaus für Si

- $E_{Gap} = 1.12 \text{ eV}$
- $k_B T = 0.026 \text{ eV}$
- $E_C - E_D$ für Si:As, n-Typ (Donator) : 54 meV
- $E_A - E_V$ für Si:Ga, p-Typ (Akzeptor): 72 meV

- Typische Dotierungskonzentration: 10^{14} – 10^{20} cm $^{-3}$, mit $5 \cdot 10^{22}$ cm $^{-3}$ Si Atomen

3.3.2 Kontaktpotential

Was geschieht, wenn zwei Leiter miteinander in Kontakt gebracht werden?

Dazu betrachten wir zuerst die Energie, die benötigt wird, um ein Elektron vom Material zu entfernen. Diese Energie ist gegeben durch die Austrittsarbeit W (siehe Kapitel 1.1.1):

$$\boxed{W = E_{vac} - E_F} \quad \text{Austrittsarbeit} \quad (3.25)$$

Hier ist E_{vac} die Energie des ungebundenen Elektrons und E_F ist die Fermienergie. Zwei unterschiedliche Leiter haben normalerweise unterschiedliche Austrittsarbeiten. Werden die beiden Leiter zusammengebracht, fließen deshalb Ladungsträger vom Leiter mit der höheren Fermienergie zum Leiter mit der tieferen Fermienergie. Die Energiedifferenz wird Kontaktpotential genannt:

$$\boxed{E_{Kontakt} = W_2 - W_1 = \Delta E} \quad \text{Kontaktpotential} \quad (3.26)$$

(Das Kontaktpotential wird als „Potential“ bezeichnet, obwohl es eine Energie ist). Hier ist W_1 und W_2 die jeweilige Austrittsarbeit des entsprechenden Leiters. Die Kontaktspannung ist:

$$U_{Kontakt} = \frac{E_{Kontakt}}{e} = \frac{W_2 - W_1}{e} = \frac{\Delta E}{e} \quad (3.27)$$

Kommen die beiden Leiter in Kontakt, fließen Ladungen vom einen in den anderen Leiter. Die Ladungen fließen so lange, bis sich ein elektrisches Gegenfeld aufgebaut hat, das die Kontaktspannung genau kompensiert und die Fermienergie über beide Leiter konstant ist (siehe Abb. 3.10).

3.3.3 pn-Halbleiterübergänge

Bringt man zwei unterschiedlich dotierte Halbleiter (aus demselben Material) zusammen, entsteht an der Kontaktstelle ebenfalls ein Kontaktpotential (siehe Abb. 3.11 links):

$$E_{Kontakt} = E_{F,p} - E_{F,n} = e \cdot U_{eingebaut} \quad (3.28)$$

Da $E_{F,p}$ und $E_{F,n}$ nahe beim Valenzband resp. beim Leitungsband liegen, ist das Kontaktpotential von der Größenordnung der Halbleiterbandlücke ($E_{Kontakt} \approx E_{Gap}$).

Wie bei Metallen wird auch bei Halbleitern das Kontaktpotential durch Ladungsträger ausgeglichen (siehe Abb. 3.11 rechts): Elektronen diffundieren von der n-dotierten Seite auf die p-dotierte Seite (und analog Löcher von der p-dotierten auf die n-dotierte Seite). Im Übergangsbereich rekombinieren die Elektronen mit den Löchern und es bildet sich eine Raumladungszone (RLZ), welche frei von mobilen Ladungsträgern ist. In diesem Gebiet befinden sich jedoch ortsfeste Ladungen in Form von ionisierten Dotieratomen. Der pn-Übergang leitet keinen Strom, obwohl sowohl die p-dotierte wie auch die n-dotierte Seite leitend sind!

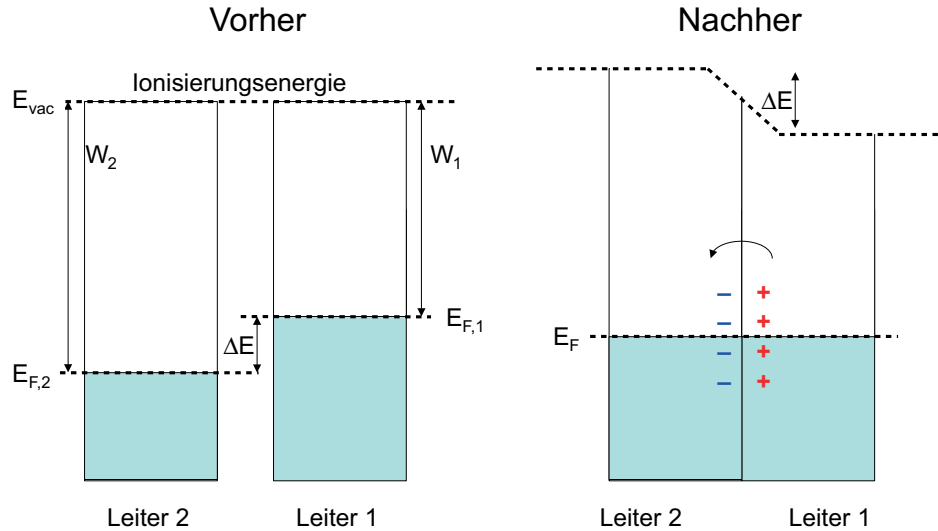


Abbildung 3.10: Kontaktpotential von zwei Metallen

3.3.4 Diode

Die Leitfähigkeit des pn-Übergangs kann durch eine Spannung verändert werden (siehe Abb. 3.12). Dieses Verhalten wird in Dioden ausgenutzt, zum Beispiel für die Gleichrichtung von Wechselströmen.

Legt man eine Spannung an beobachtet man ein unterschiedliches Verhalten je nach Vorzeichen der Spannung. Zu beachten ist, dass die folgenden Grafiken nicht das elektrische Potential darstellen, sondern schematisch den Verlauf der Bandstruktur am pn-Halbleiterübergang wiedergeben. Deshalb führt ein angelegtes positives Potential nicht zu einem Anheben der entsprechenden Seite, wie man das intuitiv vermuten würde.

- (a) Vorwärtsspannung (forward bias): Wird an die p-Seite eine positive Spannung angelegt, so verringert sich das Kontaktpotential. Die ladungsarme Zone wird dünner und es beginnt ein Strom zu fließen, wie in Abbildung 3.12 Mitte dargestellt.
- (b) Rückwärtsspannung (reverse bias): Wird an die p-Seite eine negative Spannung angelegt, so erhöht sich das Kontaktpotential. Die ladungsarme Zone wird breiter und der Halbleiter wird zum Isolator, wie in Abbildung 3.12 rechts zu sehen ist. Falls das elektrische Feld über der Kontaktstelle zu gross wird, kommt es zu einem Durchschlag und der Strom beginnt wieder zu fließen. Der Durchschlag ist reversibel, solange der Strom die Diode nicht überhitzt.

3.3.5 Solarzelle, Photodiode und Leuchtdiode

Halbleiterübergänge können auch dazu benutzt werden, um Licht in Strom zu wandeln oder um Licht zu erzeugen. Dabei werden entweder Photonen absorbiert oder emittiert,

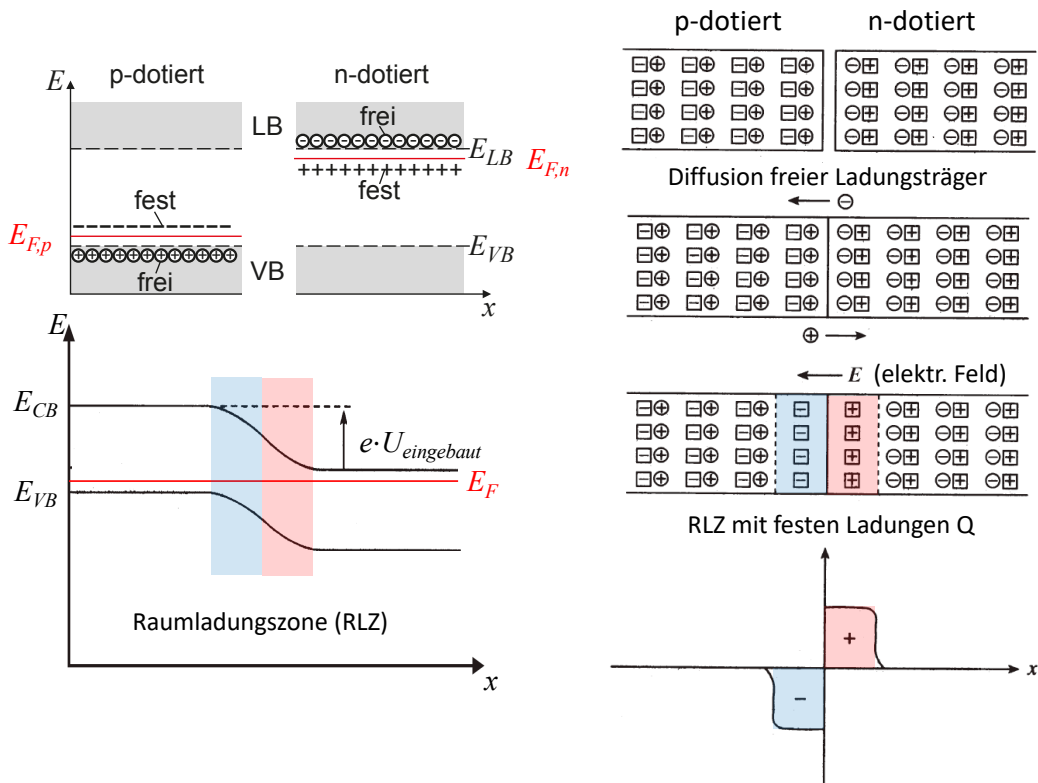


Abbildung 3.11: pn-Halbleiterübergang

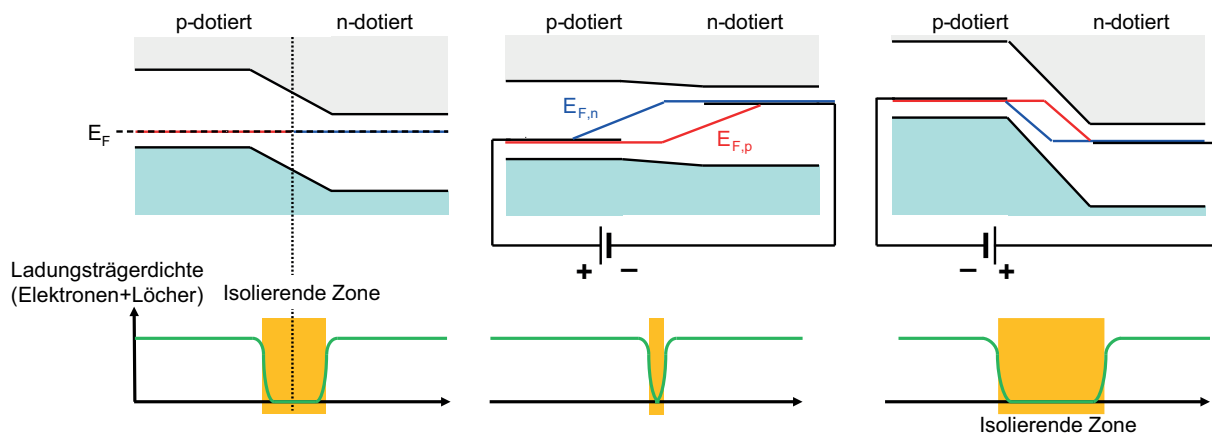


Abbildung 3.12: (Links) pn-Halbleiterübergang ohne Spannung, (Mitte) mit Vorwärtsspannung, forward bias und (Rechts) mit Rückwärtsspannung, reverse bias

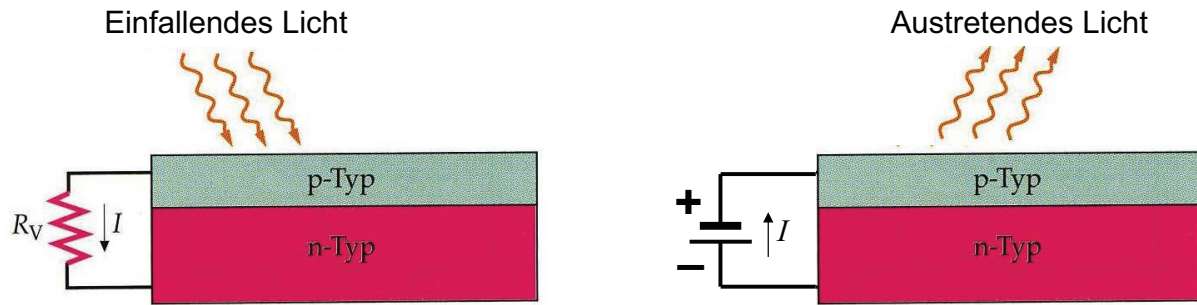


Abbildung 3.13: (Links) Solarzelle. (Rechts) Leuchtdiode (Light Emitting Diode, LED)

und das Elektron wechselt zwischen Valenz- und Leitungsband. Optisch aktive Halbleiterübergänge werden in Solarzellen, Photodioden und Leuchtdioden eingesetzt.

Solarzelle

In einer Solarzelle (Abb. 3.13 links) wird ein Elektron auf der p-Seite vom Valenzband ins Leitungsband angeregt, indem es ein Photon absorbiert. Dazu muss die Energie des Photons mindestens so gross wie die Bandlücke sein, $h\nu > E_{Gap}$. Das angeregte Elektron hinterlässt ein Loch.

Falls das Elektron in die Nähe des pn-Übergangs kommt, wird es durch die Potentialdifferenz auf die n-Seite beschleunigt. Dabei baut sich eine Spannung über dem Halbleiterübergang auf, die zur elektrischen Stromerzeugung benutzt werden kann.

Beispiel: Grenzwellenlänge einer Silizium-Solarzelle ($E_{Gap} \approx 1.1 \text{ eV}$)

$$E_{Gap} = h\nu = \frac{hc}{\lambda} \implies \lambda = \frac{hc}{E_{Gap}} = \frac{hc}{e \cdot (1.1 \text{ eV})} \approx 1.1 \mu\text{m} \quad (3.29)$$

Photodiode

In der Photodiode wird zusätzlich eine Rückwärtsspannung angelegt. Dies führt zu einer viel schnelleren Reaktion auf ein absorbiertes Photon, da die Potentialdifferenz nun viel grösser ist. Da der resultierende Strom proportional zur Anzahl eintreffender Photonen ist, kann man die Lichtintensität direkt messen.

Leuchtdiode (LED)

Eine LED (light emitting diode, siehe Abb. 3.13 rechts) ist genau das Umgekehrte einer Photodiode. Es wird eine Vorwärtsspannung angelegt, sodass eine grosse Zahl von Elektronen auf der p-Seite und Löcher auf der n-Seite entstehen. Die Elektronen und Löcher

rekombinieren nun paarweise an der Kontaktstelle unter Aussendung eines Photons. Dadurch wird Licht generiert. Die ausgesandte Wellenlänge ist ungefähr gegeben durch die Bandlücke, $\lambda = hc/E_{\text{Gap}}$.

Experiment: Charakteristiken verschiedener Bauteile auf KO

Experiment: Thermoemission/Diodenkennlinie Experiment: Heisser Glasstab leitet

3.3.6 Transistor

Ein Transistor besteht aus zwei Halbleiterübergängen, typischerweise in einer npn- oder pnp-Konfiguration. Wie wir sehen werden, kann diese Anordnung dazu benutzt werden, elektrische Ströme zu verstärken oder zu schalten.

Die beiden wichtigsten Typen sind der Bipolartransistor und der Feldeffekttransistor, welche in der Leistungselektronik sowie als Grundbaustein von logischen Schaltungen eingesetzt werden. Daneben existiert eine Reihe weiterer Transistorarten, die sich meist von einer dieser beiden Grundformen ableiten lassen.

Bipolartransistor

Bipolartransistoren werden zur Verstärkung von Strömen eingesetzt. Ein Bipolartransistor besteht aus einem npn (oder pnp) Halbleiterübergang mit drei Kontakten (siehe Abbildung 3.14): Dem Emitter (links), der Basis (mitte), und dem Kollektor (rechts).

Legt man eine Spannung zwischen Emitter und Kollektor an, so fließt erst mal kein Strom, da je nach Vorzeichen der Spannung beim np- oder pn-Übergang der Stromfluss blockiert wird.

Legt man nun zusätzlich eine Spannung an der Basis an, so wandern Ladungsträger in den p-Bereich, und die Blockade wird aufgelöst. Es beginnt nun ein Strom zwischen Emitter und Kollektor zu fließen. Zusätzlich fließt auch ein Strom durch die Basis, der wegen der kleineren Kontaktstelle jedoch viel kleiner ist. Daher kann der Transistor dazu benutzt werden, einen kleinen Kontrollstrom drastisch zu verstärken.

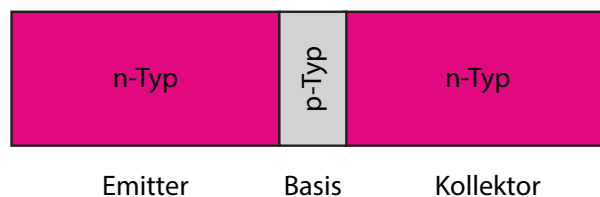


Abbildung 3.14: Bipolartransistor (nnp-Transistor mit p-Typ Sperrschicht)

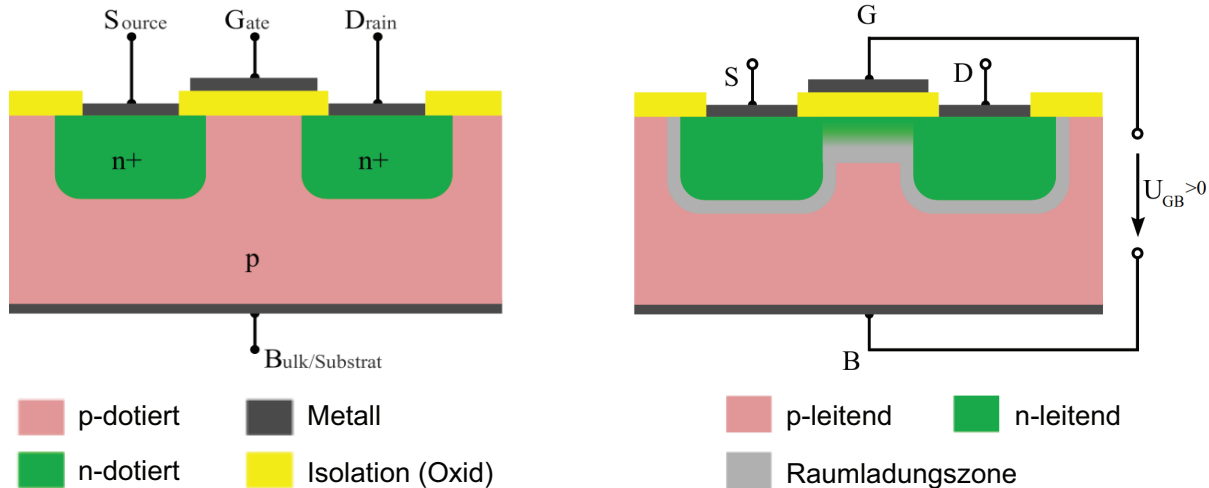


Abbildung 3.15: (Links) N-Kanal FET im ungestörten Zustand. Es gibt zwischen Source und Drain keinen leitenden Kanal, daher wird kein Strom fließen wenn man eine Spannung zwischen Source und Drain anlegt. (Rechts) Durch Anlegen einer Spannung zwischen Gate und Bulk akkumulieren sich Ladungsträger (Elektronen) an der Grenzschicht zum Gate. Dadurch bildet sich ein elektrostatisch dotierter n-Kanal zwischen Source und Drain aus.

Feldeffekttransistor

Feldeffekttransistoren (FET) dienen dazu, Spannungen ein- und auszuschalten. Da dabei nur minimale Ströme fließen, kann man sie in grosser Zahl in integrierten Schaltkreisen (z.B. Computerprozessoren) einsetzen.

Die Funktionsweise eines FET ist in der Abbildung 3.15 dargestellt, und kann auf mehrere Arten implementiert werden:

1. Als Gate-gesteuerter npn oder pnp Übergang.
2. Als Gate-gesteuerter Übergang zwischen nin oder pip, wobei das i („intrinsic“ oder „insulating“) für einen undotierten Halbleiter steht.
3. Als undotierten Halbleiter, in welchem Ladungsträger durch ein externes Feld akkumuliert werden.

Wir betrachten hier den npn Übergang, welcher zu einem „n-Kanal FET“ führt. Ein solcher FET hat vier Anschlüsse: Source, Drain, Gate und Bulk. Meistens werden Bulk und Source zusammengeschlossen und geerdet, sodass sich die Zahl der Anschlüsse auf drei reduziert. Wenn zwischen Source und Drain eine Spannung anliegt, kann kein Strom fließen (wie beim Bipolartransistor). Durch Anlegen einer Gate-Spannung akkumulieren sich Minoritätsladungsträger (in diesem Fall die Elektronen) am Gate-Isolator und ein n-leitender Kanal bildet sich aus. Dadurch werden die beiden n-leitenden Schichten miteinander verbunden und ein Strom kann zwischen Source und Drain fließen.

Das Interessante bei diesem Transistor ist, dass durch das Gate hindurch kein Strom fließt. Man kann einen FET also stromlos schalten. Dadurch kann man in integrierten Schaltungen die Verluste reduzieren und eine hohe Dichte an Transistoren auf kleinstem Raum realisieren, wie man sie in heutigen Computerchips vorfinden.

3.4 Supraleiter

Literatur: Tipler Kap. 38.8, 28.9

In einigen Materialien sinkt der spezifische Widerstand unter einer bestimmten Temperatur schlagartig auf Null ab. Dieses bemerkenswerte Phänomen wird als *Supraleitung* bezeichnet. Die Supraleitung hat wichtige technische Anwendungen (vor allem zur Konstruktion von Magneten) und obwohl sie vor etwa hundert Jahren entdeckt wurde, ist sie physikalisch noch nicht vollständig erklärt.

3.4.1 Grundlegende Beobachtungen zur Supraleitung

Einige grundlegende Beobachtungen zur Supraleitung:

- Der Übergang zur Supraleitung ist ein *Phasenübergang*. Die Leitungselektronen gehen unterhalb einer kritischen Temperatur (Sprungtemperatur) von einem normalleitenden in einen supraleitenden Zustand über, wie in Abbildung 3.16 skizziert.
- Im supraleitenden Zustand ist der elektrische Widerstand exakt Null.
- Im supraleitenden Zustand ist das Magnetfeld innerhalb des Supraleiters entweder exakt Null (Meissnereffekt), oder auf sogenannte „Flussschläuche“ (Vortex, im Plural: Vortices) beschränkt.

Experiment: Supraleitung, Widerstand von Cu, rostfreiem Stahl, PbSn

Experiment: Schwebender Supraleiter / Meissner-Effekt

Experiment: Levitationsbahn

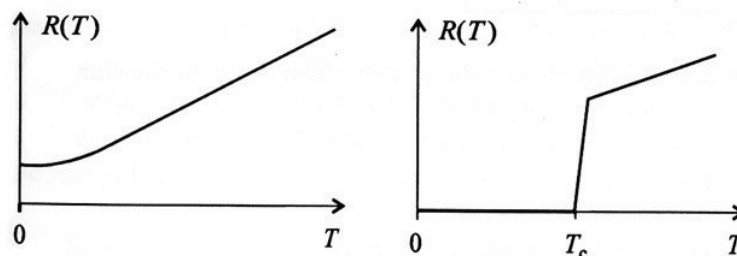


Abbildung 3.16: Elektrischer Widerstand als Funktion der Temperatur für normalen Leiter (links) und Supraleiter (rechts)

3.4.2 Mikroskopische Erklärung der Supraleitung (BCS Theorie)

Das Modell der freien Elektronen, wie wir es in Kapitel 3.1 kennengelernt haben, geht davon aus, dass sich die Elektronen gegenseitig nicht beeinflussen, und dass die Gitteratome lediglich ein (immobiles) Potential darstellen.

Im Supraleiter ist diese Annahme nicht mehr erfüllt. Supraleitung tritt auf, wenn sich die Elektronen *anziehen* können und somit paarweise auftreten. Obwohl dies unplausibel erscheint, da beide Elektronen negativ geladen sind, kann sich mithilfe der Gitteratome eine anziehende Kraft einstellen. Das erste Elektron übt eine anziehende Kraft auf ein Gitteratom aus, wodurch sich dieses etwas verschiebt. Dadurch entsteht eine positive Ladung, welche das zweite Elektron mitzieht. Das Resultat ist ein gebundener Zustand zwischen zwei Elektronen, welcher *Cooper-Paar* genannt wird.

Da die beiden Elektronen in einem Cooper-Paar entgegengesetzten Spin haben, ist der Gesamtspin des Cooper-Paares gleich Null. Damit entfällt das Pauliprinzip, und alle Cooper-Paare können dasselbe Energieniveau besetzen.

Um ein Cooper-Paar aufzubrechen, muss die Bindungsenergie aufgebracht werden. Das heisst, es gibt eine Energielücke E_{Gap} , siehe Abbildung 3.17. Die kritische Temperatur T_c und die Energielücke hängen zusammen durch:

$$E_{Gap} = 3.52k_B T_c \quad (3.30)$$

Der supraleitende Zustand kann nicht nur mit einer Temperaturerhöhung unterdrückt werden. Eine weitere Möglichkeit sind Magnetfelder, welche eine gewisse kritische Feldstärke B_c überschreiten. Bei zu hohem Magnetfeld werden die Cooperpaare (mit entgegengesetztem Spin) aufgebrochen und die Elektronen in den normalleitenden Zustand versetzt. Ebenfalls kann die Stromstärke in einem Supraleiter nicht beliebig hoch werden (kritische Stromstärke I_c), da der Strom ein Magnetfeld generiert.

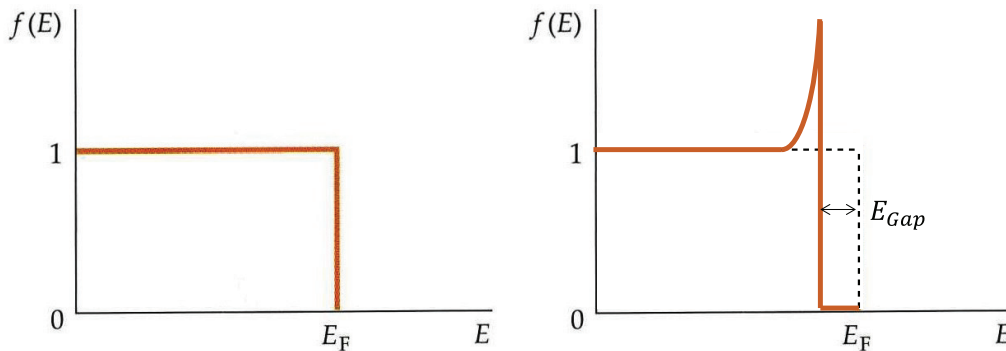


Abbildung 3.17: (Links) Besetzungswahrscheinlichkeit im normalleitenden Zustand und (Rechts) im supraleitenden Zustand (bei $T = 0$)

3.4.3 Supraleiter 1. und 2. Art

Während alle Supraleiter den Strom verlustfrei leiten, können sie sich in ihrer Fähigkeit, Magnetfelder auszuschliessen, unterscheiden. Man findet zwei unterschiedliche Typen von Supraleitern:

Supraleiter 1. Art (Typ I)

Das Magnetfeld wird bis zur kritischen Feldstärke B_c komplett aus dem Material verdrängt. Oberhalb der kritischen Feldstärke geht das Material in den normalleitenden Zustand über. Die meisten chemischen Elemente, die Supraleitung zeigen, sind vom Typ I.

Supraleiter 2. Art (Typ II)

Das Magnetfeld wird bis zu einer ersten kritischen Feldstärke $B_{c,1}$ komplett aus dem Material verdrängt, gleich wie beim Typ I. Oberhalb der ersten kritischen Feldstärke bilden sich „Flussschläuche“ (Vortices) aus. Das sind zylinderförmige Regionen, in denen Feldlinien durch den Supraleiter hindurchlaufen können. Der magnetische Fluss durch einen Flussschlauch ist immer genau $\Phi_0 = h/(2e)$. Diese Grösse wird *Fluxquantum* genannt.

Innerhalb der Flussschläuche ist das Material im normalleitenden Zustand, ausserhalb im supraleitenden Zustand. Deshalb ist der elektrische Widerstand immer noch exakt Null. Mit steigendem Magnetfeld nimmt die Anzahl Flussschläuche zu, bis oberhalb einer zweiten kritischen Feldstärke $B_{c,2}$ das Material komplett in den normalleitenden Zustand übergeht.

Im Gegensatz zu den chemischen Elementen sind die meisten chemischen Verbindungen, welche Supraleitung zeigen, vom Typ II. Die Sprungtemperaturen von Typ II sind im Allgemeinen wesentlich höher wie die Sprungtemperaturen von Typ I. Abbildung 3.18 veranschaulicht die unterschiedlichen Phasendiagramme von Supraleitern 1. und 2. Art.

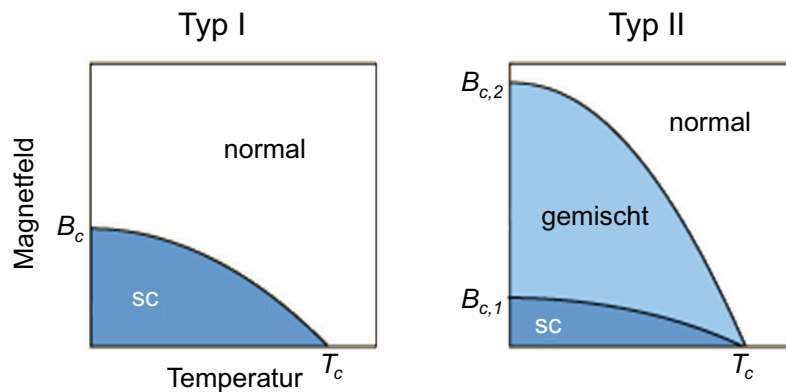


Abbildung 3.18: Phasendiagramm eines Supraleiters 1. und 2. Art

3.4.4 Hochtemperatursupraleiter (HTC Supraleiter)

Bis 1986 ging man anhand der BCS Theorie davon aus, dass Supraleiter mit einer Sprungtemperatur von über etwa 30 K nicht existieren können. In diesem Jahr wurde Supraleitung in einem keramischen Material (Lanthan Barium Kupferoxid, LBCO) mit einer kritischen Temperatur von 35 K entdeckt. Yttrium Barium Kupferoxid (YBCO) wurde ein Jahr später gefunden und war das erste Material, welches bei der Temperatur flüssigen Stickstoffs (77 K) supraleitend wird ($T_c = 93$ K) und ist heute wohl der technologisch wichtigste HTC Supraleiter. In den folgenden Jahren wurden verwandte Keramiken mit immer höheren Sprungtemperaturen gefunden. Der seit 1993 gültige „Rekord“ liegt bei etwa 130 K.

Die Entdeckung von Hochtemperatursupraleitern ist sowohl technisch wie physikalisch wichtig. Das technische Potential kommt daher, dass Hochtemperatursupraleiter effizient mit flüssigem Stickstoff auf 77 K gekühlt werden können. Allerdings bereitet das spröde keramische Material bis heute Verarbeitungsprobleme.

Der physikalische Aspekt besteht darin, dass der Mechanismus der Hochtemperatursupraleitung nicht geklärt ist. Während die BCS-Theorie „normale“ Supraleitung erklären kann, ist eine zufriedenstellende Theorie für Hochtemperatursupraleiter weiterhin ausstehend.

Anhang A

Symbole

Symbol	Einheit	Beschreibung
a_0	$5.29 \cdot 10^{-11} \text{ m}$	Bohr-Radius
c	$3.00 \cdot 10^8 \text{ m s}^{-1}$	Lichtgeschwindigkeit
e	$1.60 \cdot 10^{-19} \text{ C}$	Elementarladung
E	J	Energie
E_{kin}, E_{pot}	J	kinetische, potentielle Energie
E_F	J	Fermienergie
$E_{Gap}, E_{Kontakt}$	J	Energie von Bandlücke/Kontaktpotential
E_R	$1 \text{ Ry} = 13.6 \text{ eV}$	Rydberg-Energie
\vec{E}	V m^{-1}	Elektrisches Feld
g_e	2.00	g-Faktor des Elektrons
h	$6.63 \cdot 10^{-34} \text{ J s}$	Planck-Konstante
$\hbar = h/(2\pi)$	$1.05 \cdot 10^{-34} \text{ J s}$	Planck-Konstante (Kreisfrequenz)
k_B	$1.38 \cdot 10^{-23} \text{ J K}^{-1}$	Boltzmann-Konstante
\vec{k}	m^{-1}	Wellenvektor
\vec{L}, \vec{S}	$\text{kg m}^2 \text{ s}^{-1}$	Drehimpuls, Spindrehimpuls
l	—	Drehimpulsquantenzahl
m_l	—	magnetische Quantenzahl (des Bahndrehimpuls l)
m_s	—	magnetische Quantenzahl (des Spins s)
n, N	—	Quantenzahl; Hauptquantenzahl (Kap. 2.1)
n	m^{-3}	Teilchendichte (Teilchen pro Volumen, Kap. 3.1ff)
m	kg	Masse
m_e	$9.11 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$	Masse des Elektrons

Fortsetzung auf der nächsten Seite

Symbol	Einheit	Beschreibung
p	$\text{N s} = \text{kg m s}^{-1}$	Impuls
$P(x)$	—	Wahrscheinlichkeitsdichte
R_H	$1.10 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$	Rydberg-Konstante
s	—	Spinquantenzahl
t	s	Zeit
T	K	Temperatur
T_F	—	Fermitemperatur
v	m s^{-1}	Geschwindigkeit
v_D	m s^{-1}	Driftgeschwindigkeit
v_F	m s^{-1}	Fermigeschwindigkeit
W	J	Austrittsarbeit
x	m	Ort
Z	—	Kernladungszahl
ε_0	$8.85 \cdot 10^{-12} \text{ A s V}^{-1} \text{ m}^{-1}$	Dielektrizitätskonstante im Vakuum
λ	m	mittlere freie Weglänge (Kap. 3.2)
λ	m	Wellenlänge (Wellenlehre, Optik)
$\vec{\mu}$	J T^{-1}	magnetischer Dipol (magnetisches Moment)
μ_B	$9.27 \cdot 10^{-24} \text{ J T}^{-1}$	Bohr-Magneton
ν	s^{-1}	Frequenz
$\tilde{\nu}$	m^{-1}	Wellenzahl
τ	s	mittlere Zeit zwischen zwei Zusammenstößen (Kap. 3.2)
ψ_M	—	Wellenfunktion
$\omega = v/(2\pi)$	s^{-1}	Kreisfrequenz

Tabelle A.1: Verwendete Symbole in der Vorlesung

Anhang B

Erhaltungssätze

In einem geschlossenen System sind folgende Größen erhalten:

- *Energie*
- *Masse*
- *Ladung*
- *Impuls*
- *Drehimpuls*

Die obigen Erhaltungssätze gelten streng genommen nur unter Vernachlässigung der Relativitätstheorie. Berücksichtigt man die Relativitätstheorie, so tritt anstelle von Energie und Masse die relativistische Energie (siehe Kapitel [1.2](#)).

Neben den Erhaltungssätzen gilt ferner das Energieminimumprinzip (zweiter Hauptsatz der Thermodynamik):

Im thermodynamischen Gleichgewicht befindet sich ein System im Zustand tiefster Energie.

Anhang C

Polynome

C.1 Hermite'sche Polynome

Verwendung: Wellenfunktion des harmonischen Oszillators

Definition: $H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2} = e^{\frac{1}{2}x^2} \left(x - \frac{d}{dx} \right) e^{-\frac{1}{2}x^2}$ (C.1)

Beispiele: $H_0(x) = 1$

$$H_1(x) = 2x$$

$$H_2(x) = 4x^2 - 2$$
 (C.2)

$$H_3(x) = 8x^3 - 12x$$

$$H_4(x) = 16x^4 - 48x^2 + 12$$

C.2 Laguerre Polynome

Verwendung: Radiale Wellenfunktion des Wasserstoffatoms

Definition: $L_n(x) = \frac{e^x}{n!} \frac{d^n}{dx^n} (x^n e^{-x})$ (C.3)

Beispiele: $L_0(x) = 1$

$$L_1(x) = -x + 1$$

$$L_2(x) = \frac{1}{2} (x^2 - 4x + 2)$$
 (C.4)

$$L_3(x) = \frac{1}{6} (-x^3 + 9x^2 - 18x + 6)$$

Zugeordnete Laguerre Polynome

Verwendung: Radiale Wellenfunktion des Wasserstoffatoms

$$\text{Definition: } L_n^k(x) = \sum_{i=0}^n (-1)^i \binom{n+k}{n-i} \frac{x^i}{i!} \quad (\text{C.5})$$

$$\text{Beispiele: } L_0^k(x) = 1$$

$$L_1^k(x) = -x + (k+1)$$

$$L_2^k(x) = \frac{1}{2}x^2 - (k+2)x + \frac{1}{2}(k+2)(k+1) \quad (\text{C.6})$$

$$L_3^k(x) = -\frac{1}{6}x^3 + \frac{1}{2}(k+3)x^2 - \frac{1}{2}(k+3)(k+2)x + \frac{1}{6}(k+3)(k+2)(k+1)$$

C.3 Legendre Polynome

Verwendung: Winkelabhängige Wellenfunktion des Wasserstoffatoms

$$\text{Definition: } P_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} [(x^2 - 1)^n] \quad (\text{C.7})$$

$$\text{Beispiele: } P_0(x) = 1$$

$$P_1(x) = x$$

$$P_2(x) = \frac{1}{2}(3x^2 - 1) \quad (\text{C.8})$$

$$P_3(x) = \frac{1}{2}(5x^3 - 3x)$$

$$P_4(x) = \frac{1}{8}(35x^4 - 30x^2 + 3)$$

Zugeordnete Legendre Polynome

Verwendung: Winkelabhängige Wellenfunktion des Wasserstoffatoms

$$\text{Definition: } P_n^k(x) = (-1)^k (1-x^2)^{k/2} \frac{d^k}{dx^k} P_n(x), \text{ wobei } |k| \leq n \quad (\text{C.9})$$

Beispiele: $P_0^0(x) = 1$

$$P_1^{-1}(x) = \frac{1}{2} (1 - x^2)^{1/2}$$

$$P_1^0(x) = x$$

$$P_1^1(x) = - (1 - x^2)^{1/2}$$

$$P_2^{-2}(x) = \frac{1}{8} (1 - x^2) \tag{C.10}$$

$$P_2^{-1}(x) = \frac{1}{2} x (1 - x^2)^{1/2}$$

$$P_2^0(x) = \frac{1}{2} (3x^2 - 1)$$

$$P_2^1(x) = -3x (1 - x^2)^{1/2}$$

$$P_2^2(x) = 3 (1 - x^2)$$

Kugelflächenfunktionen (Spherical harmonics)

Verwendung: Winkelabhängige Wellenfunktion des Wasserstoffatoms

$$Y_l^m(\vartheta, \varphi) = \left(\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!} \right)^{1/2} P_l^m(\cos \vartheta) e^{im\varphi} \tag{C.11}$$

Wellenfunktion des Wasserstoffatoms

Verwendung: Winkelabhängige Wellenfunktion des Wasserstoffatoms

$$\psi_{nlm}(r, \vartheta, \varphi) = \underbrace{\sqrt{\left(\frac{2}{na_0}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n(n+l)!}}}_{\text{Normierung}} \cdot \underbrace{e^{-\rho/2} \rho^l L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho)}_{\text{Radiale Funktion}} \cdot \underbrace{Y_l^m(\vartheta, \varphi)}_{\text{Kugelflächenfunktion}}, \tag{C.12}$$

wobei $\rho = \frac{2r}{na_0}$. Hier sind (r, ϑ, φ) Polarkoordinaten, (n, l, m_l) sind die drei Quantenzahlen und a_0 ist der Bohrradius.

Abbildungsverzeichnis

1.1	Photoelektrischer Effekt	2
1.2	Compton-Streuung	5
1.3	Interferenz am Doppelspalt	8
1.4	Beugung am Einfachspalt	12
1.5	Teilchen im Kasten	17
2.1	Polarkoordinaten	23
2.2	Orbitalsymbole	28
2.3	Absorption, spontane und stimulierte Emission	32
2.4	Dreiniveaulaser	34
2.5	Aufbau eines Lasers	35
2.6	Laserhohlraum und resonante Verstärkung	36
3.1	Atom, Molekül und Festkörper	40
3.2	Energieniveaudiagramm Festkörpers	41
3.3	Fermi-Dirac-Verteilung	44
3.4	Fermiverteilung im elektrischen Feld	46
3.5	Leitertypen	46
3.6	Energieniveaudiagramm mit Bandlücke	47
3.7	Leitfähigkeit, Widerstand und Drude-Modell	48
3.8	n- und p-Dotierung	52
3.9	Bandstruktur von dotierten Halbleitern	53
3.10	Kontaktpotential zweier Metalle	55
3.11	pn-Halbleiterübergang	56
3.12	pn-Halbleiterübergang mit/ohne Spannung	56
3.13	Solarzelle und Leuchtdiode	57

3.14 Bipolartransistor	58
3.15 N-Kanal FET mit und ohne angelegte Spannung	59
3.16 Elektrischer Widerstand normaler Leiter und Supraleiter	61
3.17 Besetzungswahrscheinlichkeit: normalleitender und supraleitender Zustand	62
3.18 Phasendiagramm Supraleiter 1. und 2. Art	63

Tabellenverzeichnis

1.1	Eigenschaften von Welle und Teilchen	7
2.1	Beispiele von Wellenfunktionen	24
2.2	Eigenschaften der verschiedenen Quantenzahlen	26
2.3	Verschiedene Lasertypen	37
A.1	Verwendete Symbole in der Vorlesung	66