Molekül- und Festkörperphysik (PEP5) Version: 18.2.2021

## 1 Molekülanregungen

$$E = h\nu \qquad \nu = \frac{c}{\lambda}$$

$$E = h \cdot \frac{1}{\lambda}$$

$$M = \frac{M_1 M_2}{M_1 + M_2}$$

2-atomiges Molekül als starrer Rotator

$$\begin{split} E_{rot} &= \frac{1}{2}I\omega^2 = \frac{J^2}{2I} \\ &I = M_1R_1^2 + M_2R_2^2 = \left(\frac{M_1M_2}{M_1 + M_2}\right)R^2 \\ &J^2 = J(J+1)\hbar^2; \qquad |J| = I\omega \\ &E_{rot} &= \frac{J(J+1)\hbar^2}{2I} \\ \nu_{J\to J+1} &= \frac{\hbar}{2\pi I}(J+1) \\ &\frac{N_J}{N_0} = (2J+1)\exp\left(\frac{-E_J}{k_BT}\right) \end{split}$$

Verbindungsanregungen

$$E_{\nu} = \left(\nu + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega$$
$$\omega = \sqrt{\frac{\omega}{M}}$$
$$\Delta\nu = \pm 1$$

kombinierte Spektren

$$\begin{split} E_{\nu,J} &= E_{\nu} + E_{J} \\ E_{\nu,J} &= \left(\nu + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega + J(J+1)\frac{\hbar^{2}}{2I} \end{split}$$

- betrachte:  $v = 0 \rightarrow v = 1$
- $\Delta I = -1$  P-Zweig
- $\Delta J = 0$  Q-Zweig (meist verboten)
- $\Delta I = +1$  R-Zweig

Auswahlregel (2-atomige Moleküle)

$$\begin{split} M_{ij} &= \int \psi_i^* p \psi_j d\tau_{el} d\tau_N \\ p &= -e \sum_i r_i + Z_1 e R_1 + Z_2 e R_2 = p_{el} + p_N \\ \psi(r,R) &= \chi_N(R) + \varphi(r) \rightarrow \\ M_{ij} &= \int \chi_i^* \left[ \int \varphi_i^* p_{el} \varphi_j d\tau_{el} \right] \chi_j d\tau_N + \\ &= \left[ \chi_i^* p_N \right] \left[ \int \varphi_i^* \varphi_j d\tau_{el} \right] \chi_j d\tau_N \end{split}$$

$$(|i\rangle = |j\rangle) \rightarrow (\varphi_i = \varphi_j)$$

$$\rightarrow M_{ij} = \int \chi_i^* p_N \chi_j d\tau_N$$

$$(|i\rangle \neq |j\rangle)$$

$$\rightarrow M_{ij} = \int \chi_i^* \left[ \int \varphi_i^* p_{el} \varphi_j d\tau_{el} \right] \chi_j d\tau_N$$

# 2 Bindung im Festkörper

**Lennard-Jones Potential** 

$$\varphi(r) = \frac{A}{r^{12}} \text{ oder } \varphi(r) = A'e^{-r/\rho} \text{ Abstoßung}$$

$$\varphi(r) = -\frac{B}{r^6} \text{ Van-der-Waals}$$

$$\varphi(r) = \frac{A}{r^{12}} - \frac{B}{r^6} \equiv 4\epsilon \left[ \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^6 \right]$$

Bindungsenergie von Edelkristallen

$$U_B = \frac{1}{2} \sum_{m} \varphi_m = \frac{N}{2} \varphi_m$$
$$= 2N\epsilon \sum_{n \neq m} \left[ \left( \frac{\sigma}{r_{mn}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r_{mn}} \right)^6 \right]$$

 $r_{mn} = p_{mn}R$ , R: Abstand direkte Nachbarn

$$p_{mn}$$
: z.B fcc-Kristall: = 1,  $\sqrt{2}$ , 2,...  

$$0 = \frac{dU_B}{dR}\Big|_{R_0} \Rightarrow R_0 = 1,0902\sigma$$

$$\Rightarrow U_B(R_0) = -8,61N\epsilon$$

Ionenbindung

$$\varphi_{m} = \sum_{n \neq m} \left[ \frac{A}{r_{mn}^{12}} \pm \frac{e^{2}}{4\pi\epsilon_{0}r_{mn}} \right]$$

$$\approx z \frac{A}{R^{12}} - \sum_{n \neq m} \frac{\pm e^{2}}{4\pi\epsilon_{0}p_{mn}R} = z \frac{A}{R^{12}} - \alpha \frac{e^{2}}{4\pi\epsilon_{0}R}$$
Bragg-Bedingung
$$\lambda = 2d_{hkl} \sin \theta$$

$$\alpha \equiv \sum_{n \neq m} \frac{\pm 1}{p_{mn}}$$

$$U_B = N \cdot \varphi_m \stackrel{Edelgaskr.}{=} - \frac{N\alpha e^2}{4\pi\epsilon_0 R_0} \left(1 - \frac{1}{12}\right)$$

Kovalente Bindung  $(H_2^+)$ 

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_a} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_b} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R_{AB}}$$

LCAO-Methode:

$$\psi = c_1 \varphi_a + c_2 \varphi_b$$

$$E = \frac{\int \psi^* H \psi dV}{\int \psi^* \psi dV} = \frac{c_1^2 H_{aa} + c_2^2 H_{bb} + 2c_1 c_2 H_{ab}}{c_1^2 + c_2^2 + 2c_1 c_2 S}$$

$$H_{ij} = \int \psi_i^* H \psi_j dV, S = \int \psi_a^* \psi_b dV$$

$$E_{s;a} = \frac{H_{aa} \pm H_{ab}}{1 \pm S} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R_{AB}}$$

definiert über: 
$$\frac{V}{N} = \frac{4}{3}\pi r_s^3$$

$$\frac{\epsilon_{oul}}{N} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{9}{10r_s}$$

$$\frac{E_{kin}}{N} = \frac{3}{5}E_F = \frac{3}{5}\frac{\hbar^2}{2m_e} \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{\frac{2}{3}} \frac{1}{r_s^2}$$

$$\frac{E_{aus}}{N} = -\frac{3e^2}{16\pi^2\epsilon_0} \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{\frac{1}{3}} \frac{1}{r_s}$$

$$\frac{E_B}{N} = \left[ -\frac{24.35}{(r_s/a_0)} + \frac{30.1}{(r_s/a_0)^2} - \frac{12.5}{(r_s/a_0)} \right] \frac{eV}{Atom}$$

$$f_{lpha} pprox \int_{0}^{R_{lpha}} 4\pi r^{2} \rho(r) dr = Z$$
  
Röntgen-Streuung:  
 $\rho(r) = |\Psi_{0}(r)|^{2} = \frac{1}{\pi a_{0}^{3}} e^{-2r/a_{0}}$ 

$$f_H(K) = \frac{1}{\left[1 + \left(\frac{1}{2}a_0K\right)^2\right]^2}$$

An was wird gestreut

• Kern: *n* 

• Schale:  $\gamma$ , e, a

• Volumen:  $\gamma$ , n

schiedliche

5 Strukturelle Defekte

Leerstellendiffusion

• Oberfläche: e, a und Ionen

Inkohärente Streuung:

→ Strukturbestimmung

• Inelastische Streuung:

 $j_{diff} = -D\nabla n_L; \qquad n_L = \frac{N_L}{N_L}$ 

 $v = v_0 \exp\left(-\frac{E_D}{k_B T}\right)$ 

 $L = \sqrt{6Dt}$ 

6 Gitterdynamik

**Lineare Kette** 

Kohärente Streuung: alle Atome

keine Strukturbestimmung möglich

· Elastische Streuung: Ortsinformation

strahlen mit gleicher Phase ab

Phononen, Zusammenstellung

 $D = \frac{1}{2}a^2v \qquad v : Sprungfrequenz$ 

 $F_s = \sum C_n \left( u_{s+n} - u_s \right)$ 

 $u_{s+n} = U \exp(-i(\omega t - q(s+n)a))$ 

 $M\frac{d^2u_s}{dt^2} = \sum_{s>0} C(u_{s+1} - 2u_s + u_{s-1})$ 

 $\omega = 2\sqrt{\frac{C}{M}} \left| \sin\left(\frac{qa}{2}\right) \right|$ 

 $U_{s+1} = U \exp(-i(\omega t - q(s \pm 1)a))$ 

 $M\frac{d^2u_s}{dt^2} = \sum C_n (u_{s+n} - u_s)$ 

Nächste Nachbar Wechselwirkung:

**TODO: Pseudo-Potential** 3 Struktur der Festkörper

**Metallische Bindung** 

 $\frac{E_{coul}}{N} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{9}{10r_c}$ 

 $r_s$  definiert über:  $\frac{V}{N} = \frac{4}{3}\pi r_s^3$ 

 $\frac{E_{kin}}{N} = \frac{3}{5}E_F = \frac{3}{5}\frac{\hbar^2}{2m_a} \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{\frac{2}{3}} \frac{1}{r^2}$ 

 $\frac{E_{aus}}{N} = -\frac{3e^2}{16\pi^2 \epsilon_0} \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{\frac{1}{3}} \frac{1}{r}$ 

# Elementarzellen

- Primitv: Je ein Gitterpunkt
- nicht-primity: 2/4/...
- Wigner-Seitz-Zelle: Gitterpunkt im Mittelpunkt. schließt Raum ein der näher als jedem anderen Punkt ist.

## **Bravais-Gitter**

## 4 Strukturbestimmung Reziprokes-Gitter

$$a_i \cdot b_i = 2\pi \delta_{ij} = \begin{cases} 2\pi & \text{für } i = j \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$
$$b_1 = \frac{2\pi}{V_Z} (a_2 \times a_3)$$
$$b_2 = \frac{2\pi}{V_Z} (a_3 \times a_1)$$
$$b_3 = \frac{2\pi}{V_Z} (a_1 \times a_2)$$

$$\lambda = 2d_{hkl}\sin(\Theta)$$
;  $\lambda n = 2d\sin(\Theta)$ 

#### Strukturfaktor

$$\begin{split} r_{\alpha} &= u_{\alpha}a_1 + v_{\alpha}a_2 + \omega_{\alpha}a_3 \\ S_{hkl} &= \sum_{\alpha} f_{\alpha}(G)e^{-2\pi i(hu_{\alpha} + kv_{\alpha} + l\omega_{\alpha})} \end{split}$$

kubisch primitv, zweiatomige Basis CsCl

$$S_{hkl} = \begin{cases} f_{Cs} + f_{Cl}\pi & h+k+l \text{ gerade} \\ f_{Cs} - f_{Cl} & h+k+l \text{ ungerade} \end{cases}$$

kubisch raumzentriert, einfache Basis

$$S_{hkl} = \begin{cases} 2f\pi & h+k+l \text{ gerade} \\ 0 & h+k+l \text{ ungerade} \end{cases}$$

kubisch flächenzentriert, einfache Basis

$$S_{hkl} = \begin{cases} 4f\pi & \text{alle gerade / ungerade} \\ 0 & \textit{sosnt.} \end{cases}$$

### Atom-Strukturfaktor

$$f_{\alpha}(K) = \int_{V_{\alpha}} \rho_{\alpha}(r) e^{iK \cdot r} dV$$

$$\text{Neutronen-Streuung } K \cdot r \ll 1:$$

$$f_{\alpha} \approx \int_{0}^{R_{\alpha}} 4\pi r^{2} \rho(r) dr = Z$$

$$\text{Röntgen-Streuung:}$$

$$\lambda \gg a : qa \to 0 \sin(x) \approx x:$$

$$\omega = \sqrt{\frac{a^{2}C}{M}} q = vq$$

$$v_{p} = \frac{\omega}{q} \approx \frac{\partial \omega}{\partial q} = v_{g}$$

$$v_{Schall} = \frac{\partial \omega}{\partial q} \Big|_{q \to 0}$$

**Zweiatomige Basis** 

Γ-Punkt (Schall)

$$\omega_{a,o}^{2} = \frac{C}{\mu} \mp C \sqrt{\frac{1}{\mu^{2}} - \frac{4}{M_{1}M_{2}} \sin^{2}\left(\frac{qa}{2}\right)}$$

$$\omega_{a,o}^{2} = \frac{C'}{M} \mp \frac{1}{M} \sqrt{(C')^{2} - 4C_{1}C_{2} \sin^{2}\left(\frac{qa}{2}\right)}$$

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{M_{1}} + \frac{1}{M_{2}}; \quad C' = C_{1} + C_{2}$$

p-atomige Basis

unter-

Dynamik,

Phasenverschiebung,

- 3 akustische Zweige (1xL, 2xT)
- 3(p-1) optische Zweige

Übernächste NN:

$$\omega^2(q) = \frac{4C}{M} \sin^2\left(\frac{qa}{2}\right) \left[1 + \frac{4}{v}\cos^2\left(\frac{qa}{2}\right)\right]$$

## 7 Thermische Eigenschaften

Wärmekapazität

$$C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_V$$

$$U = 6N\frac{1}{2}k_BT = 3Nk_BT$$

$$C_V = 3Nk_B = 3R \text{ Dulong-Petit}$$

$$U = \int_0^\infty ED(E)\langle n(E,T)\rangle dE$$

Zustandsdichte im q-Raum:

$$V_q = \left(\frac{2\pi}{L}\right)^3 \to \rho_q = \frac{1}{V_q} = \frac{V}{(2\pi)^3}$$

Zahl der Zustände:

$$D(q)dq = \rho_q 4\pi q^2 dq = \frac{V}{2\pi} q^2 dq$$

$$q \to \omega(\text{für isotrope Kristalle})$$

$$D(\omega)d\omega = D(q)\frac{dq}{d\omega}d\omega = \frac{V}{2\pi^2}q^2\frac{dq}{d\omega}d\omega$$

-> Debye-Näherung Lineare Dispersion  $\omega = \nu q$ 

Molekül- und Festkörperphysik (PEP5) Version: 18.2.2021

$$D(\omega)d\omega = \frac{V}{2\pi^2} \frac{\omega^2}{v^3} d\omega$$

$$N = \int_0^{\omega_{max}} \frac{V}{2\pi^2} \frac{\omega^2}{v^3} d\omega$$

$$\omega_{max} = \omega_D = v^3 \sqrt{\frac{6\pi^2 N}{V}} = \frac{v}{a} \left(6\pi^2\right)^{1/3}$$

$$D(\omega) = \frac{V}{2\pi^2} \omega^2 \left(\frac{1}{v_l^3} + \frac{2}{v_t^3}\right) = \frac{3V}{2\pi^2} \frac{\omega^2}{v_D^3}$$

Für nicht-lineare Dispersion:

$$D(\omega)d\omega = \frac{V}{2\pi^2}q^2\frac{dq}{d\omega}d\omega = \frac{V}{2\pi^2}\frac{q^2}{v_g}d\omega$$
$$= Z_3(q)d^3q$$

 $U = \int_{-\infty}^{\infty} \hbar \omega D(\omega) \langle n(\omega, T) \rangle d\omega$ 

Wärmekapazität - Debye Näherung

$$\langle n(\omega, T) \rangle = \frac{1}{\exp(\hbar \omega / k_B T) - 1}$$

$$U(T) = \frac{9N}{\omega_D^3} \int_0^{\omega_D} \frac{1}{\exp(\hbar \omega / k_B T) - 1} d\omega$$

$$\Theta = \frac{\hbar \omega_D}{k_B} \qquad \text{Debye-Temp.}$$

$$C_V = 9Nk_B \left(\frac{T}{\Theta}\right)^3 \int_0^{x_D} \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2} dx$$

$$x = \frac{\hbar \omega}{k_B T}; \quad x_D = \frac{\hbar \omega_D}{k_B T} = \frac{\Theta}{T}$$

Für hohe Temperaturen:

$$C_V = 3Nk_B$$

Für tiefe Temperaturen:

$$C_V = \frac{12\pi^4}{5} N k_B \left(\frac{T}{\Theta}\right)^3$$

Zahl der angeregten Phononen - Debye Näherung:

$$N_{ph} = \int_0^{\omega_D} D(\omega) \langle n(\omega, T) \rangle d\omega$$
$$= \frac{3V}{2\pi^2 v_D^3} \left(\frac{k_B T}{\hbar}\right)^3 \int_0^{x_D} \frac{x^2}{e^x - 1} dx$$

$$N_{ph} \propto \begin{cases} T^3 & \text{für } T \ll \Theta \\ T & \text{für } T \gg \Theta \end{cases}$$

Allgemein gilt für Funktionen:

$$\begin{split} \langle g(\omega) \rangle_D &= \sum_{q,i} g(\omega_{qi}) \\ &= \sum_i \int_{q_D} d^3 q Z_3(q) g(\omega_{qi}) \\ &= \sum_i \int_0^{\omega_D} d\omega D(\omega) g(\omega) \end{split}$$

Wärmekapazität - Einstein Näherung

$$\langle n(\omega, T) \rangle = \frac{1}{\exp(\hbar \omega / k_B T) - 1} + \frac{1}{2}$$

$$D(\omega) = 3N \delta(\omega - \omega_E)$$

$$C_V = 3N k_B \left(\frac{\Theta_E}{T}\right)^2 \frac{\exp\left(\frac{\Theta_E}{T}\right)}{\left[\exp\left(\frac{\Theta_E}{T}\right) - 1\right]^2}$$

$$\Theta_E = \frac{\hbar \omega_E}{k_B}$$

Wärmeleitfähigkeit Fourrier-Gleichung für Wärmefluss:

$$j_Q = -\lambda \nabla T$$

kinetische Gastheorie (Phononen = ideales Gas):

$$\lambda = \frac{1}{3}C\nu l$$

- C spez. Wärme
- ν mittlere Geschwindigkeit
- *l* mittlere freie Weglänge

$$\lambda = \frac{1}{3} \sum_{j} \int_{0}^{\omega_{max}} c_{j}(\omega) \nu_{j}(\omega) l_{j}(\omega) d\omega$$
$$c_{j}(\omega) = \frac{dC_{j}}{d\omega}$$

Mehrere unabhängigen Streumechanismen:

$$\frac{1}{l} = \frac{1}{l_A} + \frac{1}{l_B} + \dots$$

Temperaturabhängigkeit:

$$\lambda \propto \begin{cases} \frac{1}{T} & \text{für } T \gg \Theta_D \text{ Ph-Ph} \\ T^n e^{\frac{\Theta_D}{T}} & \text{für } T \ll \Theta_D \text{ Ph-Ph (n=0-3)} \\ T^3 & \text{für } T \ll \Theta_D \text{ Ph-Defekt} \end{cases}$$

8 Elektronen im Festkörper

Elektronen sind Fermionen: Fermi-Dirac Statistik:

$$\langle f(E,T)\rangle = \frac{1}{\exp\left(\frac{E-\mu}{k_B T}\right) + 1}$$

Dispersion:

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

Freies Elektronengas - Zustandsdichte

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

**Chemisches Potenzial und Fermi Energie** 

$$\mu = \left(\frac{\partial F}{\partial N}\right)_{T,V}$$
 
$$E_F = \mu(T=0)$$

Mit  $n = \frac{N}{V} = \int_0^\infty D(E) f(E, T = 0) dE =$  $\int_{0}^{E_F} D(E)dE$  lässt sich leicht zeigen:

$$E_{F} = \frac{\hbar^{2}}{2m} (3\pi^{2}n)^{\frac{2}{3}}$$

$$k_{F} = (3\pi^{2}n)^{\frac{1}{3}}$$

$$n = \frac{k_{F}^{3}}{3\pi^{2}}$$

$$\nu_{F} = \frac{\hbar}{m} (3\pi^{2}n)^{\frac{1}{3}} = \frac{\hbar}{m} k_{F}$$

$$T_{F} = \frac{E_{F}}{k_{R}}$$

Spezifische Wärme (Sommerfeld):

$$c_V^{el} \approx \frac{\pi^2 T}{3T_F} \frac{2nk_B}{2} = \gamma T$$

**Elektronen im periodischen Potenzial** 

$$\begin{split} V(r) &= \sum_G V_G e^{iG \cdot r} \\ \psi_k(r) &= \left( \sum_G c_{k-G} e^{-iG \cdot r} \right) e^{ik \cdot r} = u_k(r) e^{ik \cdot r} \\ \psi_k(r+R) &= \psi_k(r) e^{ik \cdot R}, \quad \psi_{k+G}(r) = \psi_k(r) \end{split}$$

#### 9 Elektronische Transporteigenschaften

**Effektive Masse** 

$$\begin{split} \nu_n(k) &= \frac{1}{\hbar} \nabla_k E_n(k) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E_n(k)}{\partial k} \\ F &= \hbar \frac{dk}{dt} = -e \left[ \mathcal{E}(r,t) + \nu(k) \times B(r,t) \right] \\ \frac{d\nu_i}{dt} &= \sum_{j=1}^3 \left( \frac{1}{m^*} \right)_{ij} F_j \\ \left( \frac{1}{m^*} \right)_{ij} &= \frac{1}{\hbar} \frac{\partial^2 E(k)}{\partial k_i \partial k_j} \end{split}$$

Ladungstransport

$$\begin{split} j &= -\frac{e}{V} \sum_{k} \nu(k) = -\frac{e}{V} \int \rho_{k} \nu(k) f(E, T) d^{3}k \\ &= \frac{-e}{4\pi^{3}} \int \nu(k) f(E, T) d^{3}k \\ T &\to 0: \\ j &= \frac{-e}{4\pi^{3}\hbar} \int_{besetzt} \nabla_{k} E(k) d^{3}k \end{split}$$

Ladungstransport - Löcher

$$j = \frac{-e}{4\pi^3} \int_{besetzt} \nu(k)d^3k$$

$$= \frac{-e}{4\pi^3} \left[ \int_{BZ} \nu(k)d^3k - \int_{leer} \nu(k)d^3k \right]$$

$$= \frac{+e}{4\pi^3} \int_{leer} \nu(k)d^3k$$

Driftgeschwindigkeit:

$$v_d = (v - v_{th}) = -\frac{e\tau}{m}\mathcal{E} = -\mu\mathcal{E}$$

Beweglichkeit / Mobilität:

$$\sigma = ne\mu = \frac{ne^2\tau}{m} = \frac{ne^2l}{mv_F}$$

Sommerfeld-Theorie

$$\sigma = ne\mu = \frac{ne^2\tau(E_F)}{m}$$

### 10 Halbleiter

Eigenleitung

$$\sigma = e(n\mu_n + p\mu_p)$$

$$\mu = \frac{e\tau}{m^*}$$

$$n = \int_{E_L}^{\infty} D_L(E) f(E, T) dE$$

$$p = \int_{-\infty}^{E_V} D_V(E) (1 - f(E, T)) dE$$

intrinsische Ladungsträgerdichte

$$D_L(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_n^*}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{E - E_L}$$

$$D_V(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_p^*}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{E_V - E}$$

$$\Rightarrow \text{Freie Ladungen:}$$

$$n = N_L \exp\left(-\frac{E_L - E_F}{k_B T}\right)$$

$$p = N_V \exp\left(\frac{E_V - E_F}{k_B T}\right)$$

Lage des Fermi-Niveaus

$$n_i = p_i = \sqrt{N_L N_V} \exp\left(-\frac{E_g}{2k_B T}\right)$$

$$E_F = \frac{E_L + E_V}{2} + \frac{k_B T}{2} \ln\left(\frac{N_V}{N_L}\right)$$

$$= \frac{E_L + E_V}{2} + \frac{3k_B T}{4} \ln\left(\frac{m_p^*}{m_n^*}\right)$$

Ladungsträgerdichte & Fermi-Niveau Wahrscheinlichket, dass eine Störstelle nicht

$$\begin{split} \frac{n_D^0}{n_D} &= 2\frac{1}{e^{(E_D - E_F)/k_B T} + 1} \\ \frac{n_A^0}{n_A} &= 4\frac{1}{e^{(E_F - E_A)/k_B T} + 1} \end{split}$$

$$\frac{n(n_A + n)}{n_D - n_A - n} = N_L \exp\left(-\frac{E_d}{k_B T}\right)$$
$$E_d = E_L - E_D$$

- Sehr tiefe Temperaturen: Kompensationsbereich:

 $n \approx \frac{n_D n}{n_A} e^{-E_d/k_B T}$ 

 $E_F \approx E_L - E_d + k_B T \ln \left( \frac{n_D}{n_A} \right)$ 

E<sub>F</sub> wird durch Donatoren bestimmt.

- Tiefe Temperaturen: Störstellenreserve:

 $n \approx \sqrt{N_L n_D} \exp\left(-\frac{E_d}{2k_B T}\right)$ 

$$n \approx \sqrt{N_L n_D} \exp\left(-\frac{L_d}{2k_B T}\right)$$
$$E_F \approx E_L - \frac{E_d}{2} + \frac{k_B T}{2} \ln\left(\frac{N_L}{n_D}\right)$$

E<sub>F</sub> liegt etwa in der Mitte der Bänder.

- Mittlere Temperaturen: Störstellenerschöpfung:

$$n \approx n_D$$
  
 $E_F \approx E_L - k_B T \ln\left(\frac{N_L}{n_D}\right)$ 

Die Temperatur ist hoch genug, um alle Störstellen zu ionisieren, aber noch zu klein, um eine große Zahl von Ladungsträgern aus dem Valenz- ins Leitungsband anzuregen.

- Hohe Temperaturen: Eigenleitung:

$$n^{2} = N_{L}^{2} \exp\left(-\frac{E_{g}}{k_{B}T}\right)$$
$$E_{F} = \frac{E_{L} + E_{V}}{2}$$

## 11 Supraleitung

1. London-Gleichung

$$\frac{dj_s}{dt} = \frac{n_s e_s^2}{m_s} \mathcal{E}$$

2. London-Gleichung

$$\nabla \times j_s + \frac{n_s e_s^2}{m_c} B = 0$$

**Londonsche Eindringtiefe** 

$$\lambda_L = \sqrt{\frac{m_s}{\mu_0 n_s e_s^2}}$$

Molekül- und Festkörperphysik (PEP5) Version: 18.2.2021

**Kritischer Strom** 

$$I_c = \frac{2\pi R}{\mu_0} B_c$$

# 12 Sonstiges

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