

1 Molekülanregungen

$$E = h\nu; \quad \nu = \frac{c}{\lambda}$$
$$E = hc \cdot \frac{1}{\lambda}$$
$$M = \frac{M_1 M_2}{M_1 + M_2}$$

2-atomiges Molekül als starrer Rotator

$$E_{rot} = \frac{1}{2} I \omega^2 = \frac{J^2}{2I}$$
$$I = M_1 R_1^2 + M_2 R_2^2 = \left(\frac{M_1 M_2}{M_1 + M_2} \right) R^2$$
$$J^2 = J(J+1) \hbar^2; \quad |J| = I \omega$$
$$E_{rot} = \frac{J(J+1) \hbar^2}{2I} = \frac{J(J+1) \hbar^2}{2MR^2}$$
$$\nu_{J \rightarrow J+1} = \frac{\hbar}{2\pi I} (J+1)$$
$$= \frac{1}{h} (E_{rot}(J+1) - E_{rot}(J))$$
$$\frac{N_J}{N_0} = (2J+1) \exp\left(\frac{-E_J}{k_B T}\right)$$

Verbindungsanregungen

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

kombinierte Spektren

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

- betrachte: $\nu = 0 \rightarrow \nu = 1$
- $\Delta J = -1$ P-Zweig $\omega_P = \omega - J \frac{\hbar}{I}$
- $\Delta J = 0$ Q-Zweig (meist verboten)
- $\Delta J = +1$ R-Zweig $\omega_R = \omega + (J+1) \frac{\hbar}{I}$

Auswahlregel (2-atomige Moleküle)

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

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

e-Orbitale ändern sich nicht

$$\rightarrow M_{ij} = \int \chi_i^* p_N \chi_j d\tau_N$$
$$\Downarrow \quad (|i\rangle \neq |j\rangle)$$

e wechselt Orbital

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

R_{min} verschiebt sich um ΔR
Kerne fangen an zu schwingen.

2 Bindung im Festkörper

Lennard-Jones Potential

$$\varphi(r) = \frac{A}{r^{12}} \text{ oder } \varphi(r) = A' e^{-r/\rho} \text{ Abstoßung}$$
$$\varphi(r) = -\frac{B}{r^6} \text{ Van-der-Waals}$$
$$\varphi(r) = \frac{A}{r^{12}} - \frac{B}{r^6} \equiv 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]$$
$$R_0 = 2^{\frac{1}{6}} \sigma \rightarrow \varphi(R_0) = -\epsilon$$

Bindungsenergie von Edelkristallen

$$U_B = \frac{1}{2} \sum_m \varphi_m = \frac{N}{2} \varphi_m$$
$$= 2N\epsilon \sum_{n \neq m} \left[\left(\frac{\sigma}{r_{mn}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{mn}} \right)^6 \right]$$
$$r_{mn} = p_{mn} R, \text{ R: Abstand direkte Nachbarn}$$
$$p_{mn}: \text{ z.B fcc-Kristall: } = 1, \sqrt{2}, 2, \dots$$
$$0 = \frac{dU_B}{dR} \Big|_{R_0} \Rightarrow R_0 = 1,0902 \sigma$$
$$\rightarrow U_B(R_0) = -8,61 N \epsilon$$

Ionenbindung

$$\varphi_m = \sum_{n \neq m} \left[\frac{A}{r_{mn}^{12}} \pm \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{mn}} \right]$$
$$\approx z \frac{A}{R^{12}} - \sum_{n \neq m} \frac{\pm e^2}{4\pi\epsilon_0 p_{mn} R}$$
$$= z \frac{A}{R^{12}} - \alpha \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R}$$
$$\alpha \equiv \sum_{n \neq m} \frac{\pm 1}{p_{mn}} \quad \downarrow \text{ für lin. Kette:}$$
$$\alpha = 2 \cdot \left(1 - \frac{1}{2} + \frac{1}{3} \dots \right) = 2 \ln(2)$$
$$U_B = N \cdot \varphi_m \stackrel{\text{Edelgaskr.}}{=} -\frac{N \alpha e^2}{4\pi\epsilon_0 R_0} \left(1 - \frac{1}{12} \right)$$

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:

$$\psi = c_1 \varphi_a + c_2 \varphi_b$$
$$E = \frac{\int \psi^* H \psi dV}{\int \psi^* \psi dV} = \frac{c_1^2 H_{aa} + c_2^2 H_{bb} + 2c_1 c_2 H_{ab}}{c_1^2 + c_2^2 + 2c_1 c_2 S}$$
$$H_{ij} = \int \psi_i^* H \psi_j dV, \quad S = \int \psi_a^* \psi_b dV$$
$$E_{s;a} = \frac{H_{aa} \pm H_{ab}}{1 \pm S} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R_{AB}}$$

Metallische Bindung
(Nur gültig für Alkalimetalle)
 r_s definiert über: $\frac{V}{N} = \frac{4}{3} \pi r_s^3$

$$\frac{E_{coul}}{N} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{9}{10 r_s}$$
$$\frac{E_{kin}}{N} = \frac{3}{5} E_F = \frac{3}{5} \frac{\hbar^2}{2m_e} \left(\frac{9\pi}{4} \right)^{\frac{2}{3}} \frac{1}{r_s^2}$$
$$\frac{E_{aus}}{N} = -\frac{3e^2}{16\pi^2\epsilon_0} \left(\frac{9\pi}{4} \right)^{\frac{1}{3}} \frac{1}{r_s}$$
$$\frac{E_B}{N} = \left[-\frac{24.35}{(r_s/a_0)} + \frac{30.1}{(r_s/a_0)^2} - \frac{12.5}{(r_s/a_0)} \right] \frac{eV}{Atom}$$
$$a_0 = 0.529 \text{ \AA}$$

- ### 3 Struktur der Festkörper Elementarzellen
- Primitv: Je ein Gitterpunkt
 - nicht-primitv: 2/4/...
 - Wigner-Seitz-Zelle: Gitterpunkt im Mittelpunkt. schließt Raum ein der näher als jedem anderen Punkt ist.

4 Strukturbestimmung Reziprokes-Gitter

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

Bragg-Bedingung

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

von Laue Bedingung

$$\exp\left(i \left(\vec{k}' - \vec{k} \right) \cdot \vec{R} \right) = 1$$

Ewald

- Mittelpunkt des Kreises liegt auf einer Bragg Fläche
 - \vec{k}', \vec{k} spannen Kreis mit 2 rez. Gitter Punkten auf
- #### Millersche Indizes
- Bestimme Achsenabschnitte
 - Bilde Kehrwert & multipliziere mit Hauptnenner
 - (hkl) steht für Schar paralleler Ebenen
 - $[hkl]$ bezeichnet Richtung
 - Der Reziproke Gittervektor G_{hkl} steht senkrecht auf den Ebenen
Abstand = $d_{hkl} = \frac{1}{|\vec{G}_{hkl}|}$

Strukturfaktor

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

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

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

Atom-Strukturfaktor

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

Neutronen-Streuung $K \cdot r \ll 1$:

$$f_\alpha \approx \int_0^{R_\alpha} 4\pi r^2 \rho(r) dr = Z$$

Röntgen-Streuung:

$$\rho(r) = |\Psi_0(r)|^2 = \frac{1}{\pi a_0^3} e^{-2r/a_0}$$
$$f_H(K) = \frac{1}{\left[1 + \left(\frac{1}{2} a_0 K \right)^2 \right]^2}$$

An was wird gestreut

- Schale: γ, e, a
- Kern: n
- Volumen: γ, n
- Oberfläche: e, a und Ionen
- Kohärente Streuung: alle Atome strahlen mit gleicher Phase ab
- Inkohärente Streuung: unterschiedliche Phasenverschiebung, keine Strukturbestimmung möglich
- Elastische Streuung: Ortsinformation \rightarrow Strukturbestimmung
- Inelastische Streuung: Dynamik, Phononen, Zusammenstellung

5 Strukturelle Defekte Leerstellendiffusion

$$j_{diff} = -D \nabla n_L; \quad n_L = \frac{N_L}{V}$$
$$D = \frac{1}{6} a^2 \nu \quad \nu: \text{ Sprungfrequenz}$$
$$\nu = \nu_0 \exp\left(\frac{-E_D}{k_B T}\right)$$
$$L = \sqrt{6Dt}$$

6 Gitterdynamik Lineare Kette

$$F_s = \sum_n C_n (u_{s+n} - u_s) = M \frac{d^2 u_s}{dt^2}$$
$$u_{s+n} = U \exp(-i(\omega t - q(s+n)a))$$

Nächste Nachbar Wechselwirkung:

$$M \frac{d^2 u_s}{dt^2} = \sum_{n>0} C (u_{s+1} - 2u_s + u_{s-1})$$
$$u_{s\pm 1} = U \exp(-i(\omega t - q(s \pm 1)a))$$
$$\omega = 2\sqrt{\frac{C}{M}} \left| \sin\left(\frac{qa}{2}\right) \right|$$

Γ -Punkt (Schall)

$$\lambda \gg a: qa \rightarrow 0 \quad \sin(x) \approx x:$$
$$\omega = \sqrt{\frac{a^2 C}{M}} q = v q$$
$$v_p = \frac{\omega}{q} \approx \frac{\partial \omega}{\partial q} = v_g$$
$$v_{Schall} = \frac{\partial \omega}{\partial q} \Big|_{q \rightarrow 0}$$

Grenzfläche der 1. BZ. $q = \pm \frac{\pi}{a}$

$$v_g r = \frac{\partial \omega}{\partial q} = 0$$

Benachbarte Gitterebenen schwingen gegenphasig:

$$\frac{u_{s+1}}{u_s} = \exp(\pm i\pi) = -1$$

Zweiatomige Basis

$$\omega_{a,o}^2 = \frac{C}{\mu} \mp C \sqrt{\frac{1}{\mu^2} - \frac{4}{M_1 M_2} \sin^2\left(\frac{qa}{2}\right)}$$
$$\omega_{a,o}^2 = \frac{C'}{M} \mp \frac{1}{M} \sqrt{(C')^2 - 4C_1 C_2 \sin^2\left(\frac{qa}{2}\right)}$$
$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2}; \quad C' = C_1 + C_2$$

Grenzfälle

Γ-Punkt:

$$\omega_{ak} \approx 0$$
$$\omega_{op}^2 = \frac{2C}{\mu} = const.$$

Grenze der 1. BZ.:

$$\omega_{ak}^2 = \frac{2C}{M_1}$$
$$\omega_{op}^2 = \frac{2C}{M_2}$$

p-atomige Basis

- 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

$$C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_V$$
$$U = 6N \frac{1}{2} k_B T = 3N k_B T$$
$$C_V = 3N k_B = 3R \quad \text{Dulong-Petit}$$

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

Zustandsdichte im q-Raum:

$$V_q = \left(\frac{2\pi}{L}\right)^d \rightarrow \rho_q = \frac{1}{V_q} = \frac{L^d}{(2\pi)^d}$$

Zahl der Zustände:

$$D(\omega) d\omega = \rho_q \int_{\omega=const}^{\omega+d\omega=const} d^3q$$
$$D(\omega) d\omega = \rho_q d\omega \int_{\omega=const} \frac{dS_\omega}{|grad_q \omega|}$$
$$= \frac{L^d}{(2\pi)^d} d\omega \int_{\omega=const} \frac{dS_\omega}{v_g}$$
$$v_g = \left|\frac{d\omega}{dq}\right|; dS_\omega := \text{Flächenelement}$$

Isotrope Festkörper: (3d)

q ist Radius der Kugelfläche gleicher Frequenz im reziproken Raum

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

-> Debye-Näherung

Lineare Dispersion $\omega = vq$

$$D(\omega) d\omega = \frac{V}{2\pi^2} \frac{\omega^2}{v^3} d\omega$$
$$N = \int_0^{\omega_{max}} \frac{V}{2\pi^2} \frac{\omega^2}{v^3} d\omega$$
$$\omega_{max} = \omega_D = v \left(\frac{6\pi^2 N}{V}\right)^{\frac{1}{3}} = \frac{v}{a} (6\pi^2)^{\frac{1}{3}}$$
$$D(\omega) = \frac{V}{2\pi^2} \omega^2 \left(\frac{1}{v_l^3} + \frac{2}{v_t^3}\right) = \frac{3V}{2\pi^2} \frac{\omega^2}{v_D^3}$$
$$\frac{3}{v_D} = \frac{1}{v_l^3} + \frac{2}{v_t^3}$$

In 1/2 Dimensionen:

$$D^{(2)} = \frac{A}{4\pi^2} \frac{2\pi q}{v_g} = \frac{A}{2\pi} \frac{q}{v_g}$$
$$D^{(1)} = \frac{L}{2\pi} \frac{2}{v_g} = \frac{L}{\pi v_g}$$

Wärmekapazität – Debye Näherung

$$U = \int_0^{\omega_D} \hbar \omega D(\omega) \langle n(\omega, T) \rangle d\omega$$
$$\langle n(\omega, T) \rangle = \frac{1}{\exp(\hbar\omega/k_B T) - 1}$$
$$U(T) = \frac{9N}{\omega_D^3} \int_0^{\omega_D} \frac{1}{\exp(\hbar\omega/k_B T) - 1} d\omega$$
$$\Theta = \frac{\hbar\omega_D}{k_B} \quad \text{Debye-Temp.}$$
$$C_V = 9N k_B \left(\frac{T}{\Theta}\right)^3 \int_0^{x_D} \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2} dx$$
$$x = \frac{\hbar\omega}{k_B T}; \quad x_D = \frac{\hbar\omega_D}{k_B T} = \frac{\Theta}{T}$$

Für hohe Temperaturen:

$$C_V = 3N k_B$$

Für tiefe Temperaturen:

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

Nullpunktsenergie:

$$U_0 = \int_0^{\omega_D} \frac{\hbar\omega}{2} D(\omega) d\omega = \frac{9}{8} N k_B \Theta$$

Zahl der angeregten Phononen – Debye

Näherung:

$$N_{ph} = \int_0^{\omega_D} D(\omega) \langle n(\omega, T) \rangle d\omega$$
$$= \frac{3V}{2\pi^2 v_D^3} \left(\frac{k_B T}{\hbar}\right)^3 \int_0^{x_D} \frac{x^2}{e^x - 1} dx$$
$$N_{ph} \propto \begin{cases} T^3 & \text{für } T \ll \Theta \\ \text{für } T \gg \Theta \end{cases}$$

Allgemein gilt für Funktionen:

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

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):

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

- C spez. Wärme
- v mittlere Geschwindigkeit
- l mittlere freie Weglänge

$$\lambda = \frac{1}{3} \sum_j \int_0^{\omega_{max}} c_j(\omega) v_j(\omega) l_j(\omega) d\omega$$

$$c_j(\omega) = \frac{dC_j}{d\omega}$$

Mehrere unabhängigen Streumechanismen:

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

Temperaturabhängigkeit:

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

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:

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n)^{\frac{2}{3}}$$
$$k_F = (3\pi^2 n)^{\frac{1}{3}}$$
$$n = \frac{k_F^3}{3\pi^2}$$
$$v_F = \frac{\hbar}{m} (3\pi^2 n)^{\frac{1}{3}} = \frac{\hbar}{m} k_F$$
$$T_F = \frac{E_F}{k_B}$$

Spezifische Wärme (Sommerfeld):

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

Elektronen im periodischen Potenzial

$$V(r) = \sum_G V_G e^{iG \cdot r}$$

$$\psi_k(r) = \left(\sum_G c_{k-G} e^{-iG \cdot r}\right) e^{ik \cdot r} = u_k(r) e^{ik \cdot r}$$

$$\psi_k(r+R) = \psi_k(r) e^{ik \cdot R}, \quad \psi_{k+G}(r) = \psi_k(r)$$

9 Elektronische Eigenschaften

Transporteigen-

Effektive Masse

$$v_n(k) = \frac{1}{\hbar} \nabla_k E_n(k) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E_n(k)}{\partial k}$$
$$F = \hbar \frac{dk}{dt} = -e [\mathcal{E}(r, t) + v(k) \times B(r, t)]$$
$$\frac{dv_j}{dt} = \sum_{j=1}^3 \left(\frac{1}{m^*}\right)_{ij} F_j$$
$$\left(\frac{1}{m^*}\right)_{ij} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E(k)}{\partial k_i \partial k_j}$$

Ladungstransport

$$j = -\frac{e}{V} \sum_k v(k) = -\frac{e}{V} \int \rho_k v(k) f(E, T) d^3k$$
$$= \frac{-e}{4\pi^3} \int v(k) f(E, T) d^3k$$
$$T \rightarrow 0:$$

$$j = \frac{-e}{4\pi^3 \hbar} \int_{\text{besetzt}} \nabla_k E(k) d^3k$$

Ladungstransport – Löcher

$$j = \frac{-e}{4\pi^3} \int_{\text{besetzt}} v(k) d^3k$$
$$= \frac{-e}{4\pi^3} \left[\int_{BZ} v(k) d^3k - \int_{\text{leer}} v(k) d^3k \right]$$
$$= \frac{+e}{4\pi^3} \int_{\text{leer}} v(k) d^3k$$

Driftgeschwindigkeit:

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

Beweglichkeit / Mobilität:

Sommerfeld-Theorie

$$\sigma = ne\mu = \frac{ne^2 \tau(E_F)}{m}$$
$$j = \sigma_{el} \mathcal{E}$$

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

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

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

⇒ 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

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

$$\begin{aligned} E_F &= \frac{E_L + E_V}{2} + \frac{k_B T}{2} \ln\left(\frac{N_V}{N_L}\right) \\ &= \frac{E_L + E_V}{2} + \frac{3k_B T}{4} \ln\left(\frac{m_p^*}{m_n^*}\right) \end{aligned}$$

Ladungsträgerdichte & Fermi-Niveau
Wahrscheinlichkeit, dass eine Störstelle nicht ionisiert ist:

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

für $n_D \gg n_A$:

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

- **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_F wird durch Donatoren bestimmt.

- **Tiefe Temperaturen:**

Störstellenreserve:

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

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

E_F 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:

$$n^2 = N_L^2 \exp\left(-\frac{E_g}{k_B T}\right)$$

$$E_F = \frac{E_L + E_V}{2}$$

p-n-Übergang:

$$\left| j^f \right| = \left| j^d \right| = a(T) \exp\left(-\frac{e V_d}{k_B T}\right)$$

$$V_D := \text{Diffusionsspannung}$$

Shockley-Gleichung:

$$j(U) = j_S \left(e^{eU/k_B T} - 1 \right)$$

11 Supraleitung

$$B_c(T) = B_c(0) \left[1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^2 \right]$$

Supraleitung wird zerstört, wenn die magnetische Feldenergie der thermischen Energie am Phasenübergang entspricht:

$$\frac{B_{cth}^2(T)}{2\mu_0} = g_n(T) - g_s(T)$$

Fluss-Schlauch:

$$\Phi_0 = \frac{h}{2e} \approx 2.067 \times 10^{-15} \text{Vs}$$

1. London-Gleichung

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

s : Teilchen die den Suprastrom tragen:
BCS: $m_s = 2m$; $e_s = -2e$; $n_s = n/2$

2. London-Gleichung

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

Londonsche Eindringtiefe

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

Temperaturabhängigkeit (Gorter-Casimir-Modell)

$$\lambda_L(T) = \frac{\lambda_L^0}{\sqrt{1 - (T/T_c)^4}}$$

Thermodynamische Eigenschaften

$$G_s(B, T) = G_s(0, T) + \frac{VB^2}{2\mu_0}$$

$$\Delta S = S_n - S_s = -\frac{VB_c}{\mu_0} \frac{dB_c}{dT}$$

$$\Delta C = C_s - C_n$$

$$= \frac{VT}{\mu_0} \left[B_c \frac{d^2 B_c}{dT^2} + \left(\frac{dB_c}{dT} \right)^2 \right]$$

Kritischer Strom

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

Kritische Geschwindigkeit: kinetische Energie
= Kondensationsenergie

$$\frac{1}{2} n_s m_s v_c^2 = \frac{1}{4} D(E_F) \Delta^2$$

$$j_s = -n_s e_s v$$

$$j_c = \sqrt{\frac{3}{2}} \frac{e_s n_s \Delta}{\hbar k_F}$$

$$B_c = \mu_0 \lambda_L j_c$$

12 Sonstiges

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

Quantenmechanik

$$\bar{x} = \int \Psi^* x \Psi dV$$

$$\overline{p_x} = \int \Psi^* p_x \Psi dV; \quad p_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$$

$$\overline{E} = \int \Psi^* H \Psi dV$$

Optische Übergänge:

$$\overline{p} = e\vec{r} = e \int \Psi^* r \Psi dV$$

$$M_{ij} = e \int \Psi_i^* r \Psi_j dV$$