

# Festkörperphysik

Mitschrieb von Professor Alexey Ustinov im Wintersemester 2010/2011. Tex/PDF-Dateien einzelner Kapitel  
unter  
<https://github.com/wernwa/festk-ka-ustinov-ws1011>  
zu finden.

# Contents

<b>1 Bindungskräfte im Festkörper</b>	<b>3</b>
1.1 Bindungsenergie von Edelgaskristallen . . . . .	3
<b>2 Struktur der Kristalle</b>	<b>5</b>
2.1 Punktgruppen (min 1 Punkt fest) . . . . .	5
2.2 Einfache Kristallgitter . . . . .	6
2.3 Wigner-Seitz-Zelle . . . . .	6
<b>3 Strukturbestimmung und reziprokes Gitter</b>	<b>7</b>
3.1 Reziprokes Gitter . . . . .	7
3.2 Millersche Indizes . . . . .	8
3.3 Brillouin-Zone . . . . .	8
3.4 Beugung an Periodischen Strukturen . . . . .	8
3.5 Streubedingung . . . . .	9
3.6 Ewald-Kugel . . . . .	10
3.7 Strukturfaktor . . . . .	11
3.8 Methoden der Strukturanalyse . . . . .	11
3.9 Experimentelle Beugungsverfahren . . . . .	12
<b>4 Strukturelle Defekte 0D,1D,2D</b>	<b>13</b>
4.1 Ausgedehnte Defekte: 1D - Defekte . . . . .	14
4.2 Einkristal: Mechanische Festigkeit . . . . .	15
4.3 Plastische Deformationen . . . . .	16
4.4 Amorphe Materialien . . . . .	16
<b>5 Elastische Eigenschaften</b>	<b>18</b>
5.1 Elastische Konstanten für kubische Kristalle . . . . .	18
5.2 Konstanten für kubische Kristalle . . . . .	19
5.3 Schallwellen . . . . .	19
<b>6 Gitterdynamik und Phononen</b>	<b>21</b>
6.1 Gitterschwingungen . . . . .	21
6.2 Gitter mit 2-Atomiger Basis . . . . .	23
6.3 Quantisierung elastischer Wellen . . . . .	24
6.4 Zustandsdichte der Phononen . . . . .	26
6.5 Spezifische Wärme . . . . .	27
6.6 Debye-Näherung . . . . .	28
6.7 Anharmonische Effekte . . . . .	29
6.7.1 Thermische Ausdehnung . . . . .	30
6.7.2 Wärmeleitfähigkeit . . . . .	31
<b>8 Fermi-Gas freier Elektronen</b>	<b>32</b>
8.1 Klassisches Drude Modell . . . . .	32
8.1.1 Impuls Relaxation . . . . .	33
8.1.2 Wechselstromleitfähigkeit . . . . .	35
8.2 Sommerfeld-Theorie der Metalle . . . . .	37
8.2.1 Spezifische Wärme . . . . .	40
<b>9 Energiebänder</b>	<b>42</b>
9.1 Tight-binding Model . . . . .	47
9.2 Brillouin-Zonen und Fermi-Flächen . . . . .	50

<b>10 Elektronische Transporteigenschaften</b>	<b>53</b>
10.1 Elektronen als Wellenpakete . . . . .	53
10.2 Ladungstransport: Elektronen und Löcher . . . . .	55
10.3 Elektronen im Magnetfeld . . . . .	56
10.4 Experimentelle Methoden zur Bestimmung der Fermi-Flächen . . . . .	58
<b>11 Halbleiter</b>	<b>60</b>
11.1 Niedrigdimensionale Elektronensysteme . . . . .	61
11.2 Niedrigdimensionale elektronensysteme: 0D; 2D . . . . .	64
11.2.1 Coulomb-Blockade . . . . .	66
11.3 Quanten-Hall-Effekt in 2DEG . . . . .	67
<b>12 Magnetismus</b>	<b>69</b>
12.1 Diamagnetismus . . . . .	70
12.1.1 Diamagnetismus freier Elektronen: Landau-Diamagnetismus . . . . .	70
12.2 Paramagnetismus . . . . .	71
12.2.1 Paramagnetismus von Ionen . . . . .	71
12.3 Kühlung durch adiabatische Entmagnetisierung . . . . .	73
12.4 Ferrormagnetismus . . . . .	73
<b>13 Supraleitung</b>	<b>77</b>
13.1 London-Gleichungen (Postulate) . . . . .	79
13.1.1 Zwei Flüssigkeiten-Modell . . . . .	79
13.2 Flußquantisierung . . . . .	80
13.3 Theorie der Supraleitung . . . . .	80
13.3.1 Supraleiter 2.Art . . . . .	83

# Vorbemerkung

Festkörperphysik: Aufbau und Eigenschaften fester Materialien

Festkörper: Ansammlung von Atomkernen und Elektronen  $\approx 10^{23}$  die über elektrostatische Kräfte miteinander wechselwirken

Klassen

1. Isolatoren
2. Halbleiter
3. Metalle+Supraleiter

Fundamentale Konzepte in der Festkörperphysik:

1. Schrödinger-Gleichung
2. Pauli-Prinzip
3. Coulomb-WW
4. Maxwell-Gleichungen
5. Thermodynamik
6. Statistische Physik

*MaxBorn* Phononen=elastische Schwingungen

# Chapter 1

## Bindungskräfte im Festkörper

### 5 Grundtypen der Bindung

1. Fluktuationsbindung (Van-der-Waals Kraft)
2. Ionenbindung (NaCl)
3. Kovalente Bindung (Diamant)
4. Metallische Bindung
5. Wasserstoffbrückenbindung

Bindungsenergie die Arbeit, die bei der Zerlegung des Festkörper in seine Bestandteile (Atome oder Moleküle) aufgewendet werden muss.

	Li	Be	B	C(Diamant)
Bindungsenergie [ $\frac{eV}{Atom}$ ]	1,6	3,3	5,8	7,4
Schmelztemperatur[K]	453	1560	2348	4765

(\*) Molekülkristalle  $N_2, O_2, F_2$ . Aus diesem Grund behält die Flüssigkeit die meiste Energie.

<http://de.wikipedia.org/wiki/Lennard-Jones-Potential> Das Lennard Jones Potential: Potential zwischen neutralen Atomen (oder Molekülen) mit abgeschlossener  $e^-$ -Schale a) der anziehende Teil  $\approx -r^{-6}$  b) der abstoßende Teil  $\approx r^{-12}$

$$\boxed{\phi(r) = \frac{A}{r^{12}} - \frac{B}{r^6}}$$

pic TODO

Van-der-Waals-Bindung

pic TODO

$$\phi_{12}(\vec{r}) \propto \frac{\vec{p}_1 \vec{p}_2}{r^3} - \frac{3(\vec{p}_1 \vec{r})(\vec{p}_2 \vec{r})}{r^5}$$

### 1.1 Bindungsenergie von Edelgaskristallen

<http://de.wikipedia.org/wiki/Lennard-Jones-Potential> Das Lennard Jones Potential:

$$\phi(r) = \frac{A}{r^{12}} - \frac{B}{r^6} \quad (1.1)$$

$$= 4\epsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad (1.2)$$

das Potential minimum tritt bei  $r_0 = 2^{\frac{1}{6}}\sigma \approx 1,12\sigma$  Bindungsenergie von N Atomen

$$V_B = \frac{1}{2} \sum_i \phi_i = \frac{N}{2} \phi_1 = 2N\epsilon \sum_{j \neq 1} \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]$$

Kubisch flächenzentrierte Struktur fcc=face centered cubic  $r_{ij} = R = 12; R\sqrt{2} = 6; 2R\dots$

$$U_B = 2N\epsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} \cdot \underbrace{\left( \frac{12}{1^{12}} + \frac{6}{\sqrt{2}^{12}} + \dots \right)}_{\approx 12,13} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \cdot \underbrace{\left( \frac{12}{1^{12}} + \frac{6}{\sqrt{2}^{12}} + \dots \right)}_{\approx 14,45} \right]$$

$R_0 \approx 1,09\sigma \rightarrow$  nur für  $E_{kin} = 0$  (in qm  $E_{kin} \neq 0 \Rightarrow R_{0qm} > R_0$ ) ein Minimum von  $U_B(R)$  beim  $R = R_0 \Rightarrow$

$$\frac{dU_B}{dR} \Big|_{R=R_0} = 0; \quad \frac{d^2U_B}{dR^2} \Big|_{R=R_0} > 0$$

	Ne	Ar	Kr	Xe
$\sigma(A^\circ)$	2,74	3,40	3,65	3,98
$\epsilon(meV)$	3,1	10,4	14,1	20,0
$\frac{R_0}{\sigma}$	1,15	1,11	1,09	1,09

Nullpunktenergie

# Chapter 2

## Struktur der Kristalle

Kristalle entsprechen dem Grundzustand der Festkörper. Lehre → Kristallographie;

Symmetrie: alle Eigenschaften eines Systems, die nach einer bestimmten Änderung (Transformation) "unverändert erscheinen"

Gruppentheorie: Symmetriegruppen: ist eine Menge aller Kongruenzabbildungen die das Objekt auf sich selbst abbilden.

### 2.1 Punktgruppen (min 1 Punkt fest)

→ 32 Symmetriegruppen (Punktgruppen) z.B Drehung um eine Drehachse

pic

Spiegelung an einer Spiegelebene

pic

Punktspiegelung

pic

1,2,3,4,6 Drehachse; mspiegelung;  $\bar{1}$  Punktsiegelung

pic

Inversion + Drehung

pic  $\bar{2}$

Raumgruppen (translative Symmetrioperationen) → J.S. Fedorov

Gleitspielebene (reflection+translation)

pic

Schraubenachse (screw symmetry)

pic

Kristallstruktur: Gitter + Basis

Gitter als Umgebung

$$U(\vec{r}) = U(\vec{r} + \vec{R})$$

Translationsvektor (Gittervektor):

$$\vec{R} = n_1 \vec{a} + n_2 \vec{b} + n_3 \vec{c}$$

$\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$  sind Basisvektoren. Gitterkonstanten:  $|\vec{a}| = a$ ,  $|\vec{b}| = b$ ,  $|\vec{c}| = c$

pic

Die Vektoren spannen eine Elementarzelle auf. Das Volumen ergibt sich aus dem Spatprodukt

$$V = \vec{a} [\vec{b} \times \vec{c}]$$

Kleinstmögliche E.Z. → primitive Elementarzelle (Einheitszelle).

Bravais-Gitter → besteht nur aus einer Teilchensorte.

Kristallstruktur Bravais-G.

Anzahl von Punkgruppen 32(3D) 10(2D) 7 Kristallsyst.

Anzahl v.Raumricht 230(3D) 17(2D) 14 Bravais G.

Kristallsysteme: (Syngonien)

1. kubisches K.

2. tetragonales K.

3. rombisches K.

4. Rechtwinklig ende
5. hexagonale
6. trigonale
7. monoklines
8. triklines
9. Schiefwinklig ende

## 2.2 Einfache Kristallgitter

( $K_z$ = Koordinationszahl, zahl der nächsten Nachbarn) (p.V. Packungsverhältniss)

- **sc** → “simple cubic”  $p.V. \approx 0,52$ ; In der Natur so gut wie nicht zu finden  
2-Atom Basis  $(0,0,0)$  oder  $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$  CsCl
- **bcc**=“body centered cubic”. Kubisch raumzentrierte Gitter; 30% aller Elemente;  $p.V. \approx 0,68$   
Metalle: Na, Fe, Cr, ...  $(0,0,0)$  oder  $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$
- **fcc**=“face centered cubic”=kubisch flächenzentrierte Gitter  
Gitterpunkte  $(0,0,0)$  oder  $(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2})$  oder  $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$  oder  $(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$   $p.V. \approx 0,74$  Höchste Basisverhältniss 1  
Atom Basis, z.B. Metalle Cu, Ag, Au, Ni, ... 30% aller Elemente NaCl → fcc mit 2-Atom. Basis  $(0,0,0)$  oder  $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$  Diamant C → fcc mit 2-At. Basis  $(0,0,0)$  oder  $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$  2 unterschiedliche Atome z.B. ZnS; Strukt.v.Zinkblende; Mischung von Kovalenter Bindung und Ionenbindung.

d) Hexagonal dichteste Kugelpackung (hcp=hexagonal close packed) 35% aller Elemente;  $p.V. \approx 0,74$

pic1 (folie: Kugelpackung: hexagonal oder kubisch? hcp und fcc)

z.B. Mg, Ti, Co, ...

pic2 (folie: Primitive Elementarzelle)

## 2.3 Wigner-Seitz-Zelle

pic3 (folie: Zur 2D Konstruktion einer Wigner-Seitz-Zelle)

E.Z. mit Gitterpunkt im Zentrum der Elementarzelle; lückenlose Bedeckung der Fläche (2D) oder Volumen (3D); Polyeder mit dem kleinsten Volumen, das den Gitterpunkt ein schließt.

pic4 (folie: 3D Wigner-Seitz-Zellen)

Wigner-Seitz-Zelle ist wichtig für Reziprokes Gitter

## Chapter 3

# Strukturbestimmung und reziprokes Gitter

Beugungs- und Streuexperimente, Experimente werden mit verschiedenen Teilchen durchgeführt (Photonen, Neutronen, Neutronen, Elektronen → als Wellen)

pic4

Amplitude:  $A(t) = A_0 e^{-i(\omega_0 t - \vec{k}_0 \vec{r})}$  Amplitude der gestr. Welle:  $A_z(t) = \frac{A'}{R} e^{-i(\omega_0 t - kR)}$  Phasendifferenz:  $\Delta\phi|_{|\vec{k}|=|\vec{k}_0|} = \Delta sk = (\vec{k} - \vec{k}_0)\vec{r}$  Elastische Streuung!; die Welle ist nur 1x gestreut → Bornsche Näherung  
Volumen Element  $dV$  am Ort  $\vec{r}$ :

$$dA_s(\vec{r}, t) = \rho(\vec{r}) A_z(t) dV = \frac{A'}{R_1} \rho(\vec{r}) e^{-i(\omega_0 t - kR_1 + (\vec{k} - \vec{k}_0)\vec{r})} dV$$

$\rho(\vec{r})$ -StreudichteVerteilung  $R_1 \approx R_0$

$$A_s(\vec{r}, t) = \frac{A}{R_0} e^{-i(\omega_0 t - kR_0)} A(\vec{k} - \vec{k}_0)$$

Streuamplitude A mit dem Streuvektor ( $k-k_0$ )

$$A(\vec{k} - \vec{k}_0) = \int_V \rho(\vec{r}) e^{-i(\vec{k} - \vec{k}_0)\vec{r}} dV$$

$A(\vec{Q})$  ist die Fourier-transformierte  $\rho(\vec{r})$ ;

Strukturbestimmung:

$$\rho(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{Q-Raum} A(\vec{Q}) e^{i\vec{Q}\vec{r}} d^3 Q$$

### 3.1 Reziprokes Gitter

$\vec{A}$  Gitter;  $\vec{B}$  reziprokes-Gitter;  $b_i :=$  Basisvektor der blz. Raums  
 $\vec{A} = m_1 \vec{a}_1 + m_2 \vec{a}_2 + m_3 \vec{a}_3 \Rightarrow \vec{B} = n_1 \vec{b}_1 + n_2 \vec{b}_2 + n_3 \vec{b}_3$

$$\vec{b}_1 = 2\pi \frac{\vec{a}_2 x \vec{a}_3}{\vec{a}_1 (\vec{a}_2 x \vec{a}_3)} = 2\pi \frac{\vec{a}_2 x \vec{a}_3}{V_z}$$

$V_z$  das Volumen der Elementarzelle des realen Gitters.

$$\vec{b}_2 = 2\pi \frac{\vec{a}_3 x \vec{a}_1}{V_z}$$

$$\vec{b}_3 = 2\pi \frac{\vec{a}_1 x \vec{a}_2}{V_z}$$

$$\vec{b}_1 (\vec{b}_2 x \vec{b}_3) = \frac{(2\pi)^3}{V_z}; V_B = \frac{(2\pi)^3}{V_A}$$

für rechtwinklige Krinstallsysteme:

$$\vec{b}_{1,2,3} = \frac{2\pi}{a_{1,2,3}^2} \vec{a}_{1,2,3}^2; |\vec{b}_1| = \frac{2\pi}{|\vec{a}_1|}$$

Eigenschaften:

- $\vec{a}_i \vec{b}_i = 2\pi \sigma_{ij}$
- reziprokes Gitter für reziprokes Gitter ist reale Gitter
- $V_b = \frac{(2\pi)^3}{V_a}$
- $\vec{A} \cdot \vec{B} = 2\pi n$  mit  $n \in \mathbb{N} \rightarrow e^{\vec{A} \cdot \vec{B}} = 1$

Theorem:  $\vec{B} \rightarrow$  Kristallebenen  $\perp \vec{B}$  und mit Abstand  $d$

## 3.2 Millersche Indizes

William Miller (1839)

Millersche Indizes dienen der eindeutigen Bezeichnung von Ebenen und Richtungen (Vektoren) in Kristallsystemen. Nach Definition: 3 ganzzahlige Indizes  $(h, k, l)$ . Diese Indizes bezeichnen verschiedene Ebenen. Die Ebene, die durch drei Punkte geht:

$$\frac{1}{h}\vec{a}_1, \frac{1}{k}\vec{a}_2, \frac{1}{l}\vec{a}_3$$

pic 1 TODO

Basisvektoren schneiden die Ebenen  $(h, k, l)$  gerade an den Kehrwerten  $\frac{1}{h}, \frac{1}{k}, \frac{1}{l}$   
z.B. für kubisches Gitter

$$\{100\} = \left\{ \begin{array}{l} (100) \\ (\bar{1}00) \\ (010) \\ (0\bar{1}0) \\ (001) \\ (00\bar{1}) \end{array} \right.$$

Gitttervektoren  $[u, v, w]$  nur(!) im Kubischen Kristall:: Vektor  $\underbrace{[u, v, w]}_{u\vec{a}_1 + v\vec{a}_2 + w\vec{a}_3} \perp$  Ebene  $(u, v, w)$ ;  $[1, 0, 0]$  Würfelkante;  
[110] Flächendiagonale; [111] Raumdiagonale

## 3.3 Brillouin-Zone

Die Brillouin Zone ist eine Elementarzelle des reziproken Gitters.

1.BZ  $\stackrel{\text{def}}{=}$  die Wigner-Seitz-Zelle des reziproken Gitters  
pic 2 TODO

reelleGitter(Ortsraum)	reziprokesGitter(Impulsraum)
sc	sc
bcc	fcc
fcc	bcc

## 3.4 Beugung an Periodischen Strukturen

pic 3 TODO

Streuamplitude:

$$A(\vec{k} - \vec{k}') = A(\vec{Q}) = \int_{V_0 \leftarrow \text{Probervolumen}} e^{-i(\vec{Q}\vec{r})d^3r}$$

$$A(\vec{Q}) = \underbrace{\sum_{\text{alle EZ}} e^{-i(\vec{Q}\vec{r})}}_{\text{Gitterfaktor}} \cdot \underbrace{\sum_{\text{alle Atome } \alpha} e^{-i(\vec{Q}\vec{r}_\alpha)}}_{\text{Strukturfaktor}} \cdot \underbrace{\int_{\text{Atom } \alpha} \rho_\alpha(\vec{r}') \cdot e^{-i(\vec{Q}\vec{r}') d^3 r'}}_{f'_\alpha \text{-Atomstreu faktor (spez. für Atom)}}$$

note todo: zweite Summe und Integral: underbrace (Strukturfaktor)  
 Braggsche Beugungsbedingung:  
 pic 4 TODO

$$2dsin\theta = n\lambda$$

### 3.5 Streubedingung

Für die Streuintensität :

$$I(Q) \propto |A(\vec{Q})|^2 = \left| \int_{V_p} \rho(\vec{r}) e^{-i\vec{Q}\vec{r}} \right|^2$$

mit  $\vec{Q} = \vec{k} - \vec{k}_0$

Entwicklung von  $\rho(\vec{r})$  in eine 3D Fourier - Reihe:

$$\vec{G}_{hkl} = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3$$

$\vec{b}_i$  sind Basisvektoren des reziproken Gitters  $G$

$$\rho(\vec{r}) = \sum_{hkl} \rho_{hkl} e^{i\vec{G}_{hkl}\vec{r}}$$

Mit Fourier-Koeffizienten

$$\rho_{hkl} = \frac{1}{V_z} \int_{V_z} \rho_z e^{-i\vec{G}_{hkl}\vec{r}} dV$$

$$\rho(\vec{r}) = \rho(\vec{r} + \vec{R})$$

$$R = m_1 \vec{a}_1 + m_2 \vec{a}_2 + m_3 \vec{a}_3$$

$V_z$  - Volumen des primitiven E.Z.

$$e^{-i\vec{G}_{hkl}\vec{r}} = e^{-i\vec{G}_{hkl}(\vec{r} + \vec{R})}$$

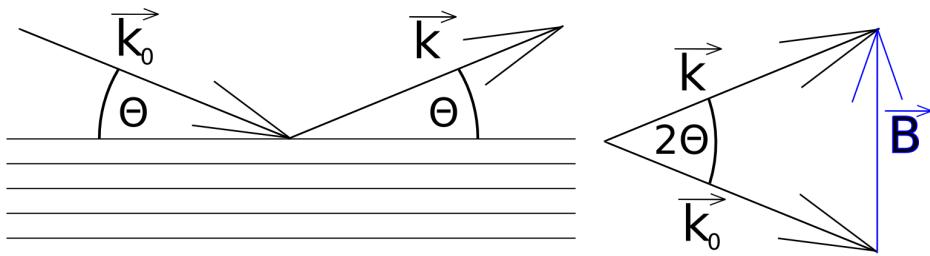
$$e^{-i\vec{G}_{hkl}\vec{r}} = 1, \vec{G}_{hkl}\vec{R} = 2\pi N, \text{ mit } N \text{ eine ganze Zahl}$$

$$\vec{a}_i \vec{b}_i = 2\pi\sigma_{ij}; \vec{G}_{hkl} = \vec{G} = \vec{B} = n_1 \vec{b}_1 + n_2 \vec{b}_2 + n_3 \vec{b}_3; n_1 = h, n_2 = k, n_3 = l;$$

$$|A(\vec{Q})|^2 = \left| \sum_{hkl} \rho_{hkl} \int_{V_p} e^{-i(\vec{B} - \vec{Q})\vec{r}} dV \right|^2$$

$$\int_{V_p} e^{-i(\vec{B} - \vec{Q})\vec{r}} dV = \begin{cases} V_p, & \text{für } \vec{Q} = \vec{B} \\ 0, & \text{für } \vec{Q} \neq \vec{B} \end{cases}$$

(Laue) Streubedingung:  $\vec{k} - \vec{k}_0 = \vec{Q} = \vec{B}$  z.B Braggsche Streubedingung

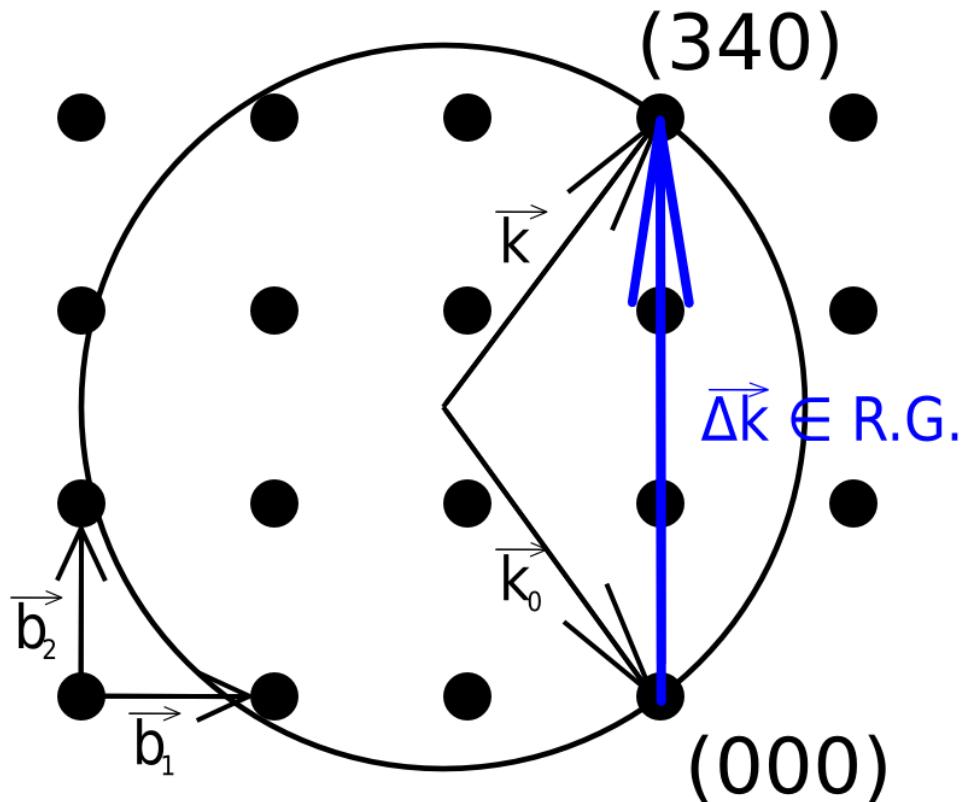


$$d = d_{hkl} = \frac{2\pi}{|\vec{B}|}$$

$$|\vec{B}| = \frac{2\pi}{d} = 2 \frac{2\pi}{\lambda} 2 \sin \theta$$

$$n\lambda = 2d \sin \theta, \lambda \ll d$$

### 3.6 Ewald-Kugel



- zeichne die Punkte des reziproken Gitters
- der Wellenvektor  $\vec{k}_0$  endet am Punkt (000)
- der Anfangspunkt von  $\vec{k}_0$  ist M
- alle Wellenvektoren mit  $|\vec{k}| = |\vec{k}_0|$  auf der Kugelfläche enden
- Beugungsmaximums treten auf bei  $\vec{k} = \vec{k}_0 + \vec{B}$

Die Reflexe sind "verschmiert" aus verschiedenen Gründen:

- Kristall mit englicher Abmessung
- Defekte
- Temperatur
- die endliche Frequenz-Schärfe  $\Delta f$  der Strahlung

### 3.7 Strukturfaktor

$$A(\vec{Q}) = \underbrace{\sum_{\text{aller E.Z.}} e^{-i\vec{Q}\vec{R}}}_{\text{Gitterfaktor}} \cdot \underbrace{\sum_{\text{aller Atome d}} e^{-i\vec{Q}\vec{r}_\alpha} f_\alpha}_{S(\vec{Q}) \text{Strukturfaktor}}$$

Strukturfaktor bestimmt Intensität; Auslöschen möglich

Gittervektor:  $\vec{B} = n_1 \vec{b}_1 + n_2 \vec{b}_2 + n_3 \vec{b}_3; \vec{r}_\alpha = u_\alpha \vec{a}_1 + v_\alpha \vec{a}_2 + w_\alpha \vec{a}_3$

$$S(\vec{Q}) = S_{skl} = \sum_\alpha f_\alpha(\vec{Q}) e^{-i\vec{Q}\vec{r}_\alpha}; \vec{a}_i \vec{b}_i = 2\pi \sigma_{ij}$$

$$S_{hkl} = \sum_\alpha f_\alpha(\vec{Q}) e^{-i2\pi(h \cdot u_\alpha + k \cdot v_\alpha + l \cdot w_\alpha)}$$

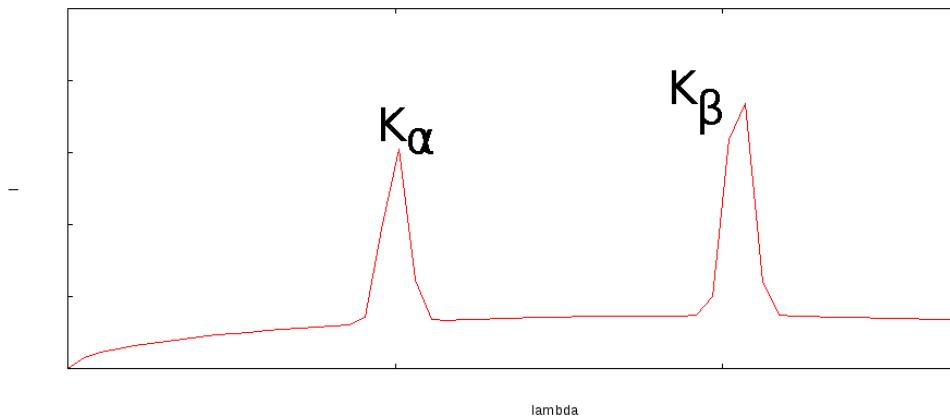
z.B. bcc Gitter mit  $\vec{r}_1 = (000); \vec{r}_2 = (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}); f_1 = f_2$

$$S_{hkl} = f_1 \left[ 1 + e^{-i\pi(h+k+l)} \right] = \begin{cases} 2f_1, & (h+k+l) \text{gerade} \\ 0, & (h+k+l) \text{ungerade} \end{cases}$$

### 3.8 Methoden der Strukturanalyse

$\lambda \leq 2d; \lambda \approx 1A$

Röntgenstrahlen Quellen sind Röntgenröhre oder Synchrotronstrahlung ( $e^-$  auf Kreisbahnen ANKA, KIT)



$$E = h\nu = \frac{hc}{\lambda}, \lambda \approx 1A, E \approx 10eV$$

1) Röntgenstrahlen:

- Streuung an Elektronen
- Formfaktor  $f_\alpha \approx Z$  (Atomzahl);  $I \approx Z^2$
- leichte Elemente schwer nachweisbar

2) Neutronen Spin  $\frac{1}{2}$   $E = \frac{p^2}{2m_N} = \frac{\hbar^2}{2m_N \lambda^2} \approx 100meV$

- Streuung an Kernen über starke Wechselwirkung (WW)
- Elektronen in der Hülle mag. Moment tragen

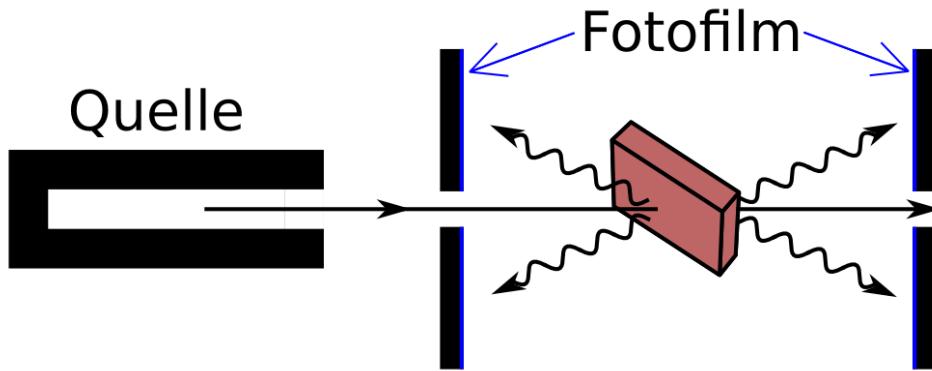
Quellen: Forschungsreaktoren (Jülich, grenoble,...)

3) Elektronen  $E = \frac{p^2}{2m_e} = \frac{\hbar^2}{2m_e \lambda^2} \approx 100eV$

- Coulomb WW mit Elektronen und Kernen
- sehr geringe Eindringtiefe
- Oberflächenphysik LEED-Methode (low energy electron diffraction)
- TEM = Transmissionselektronenmikroskopie; dünne Schichten

### 3.9 Experimentelle Beugungsverfahren

- Laue-Verfahren kontinuierliches ( $\lambda$ ) Spektrum, Einkristall

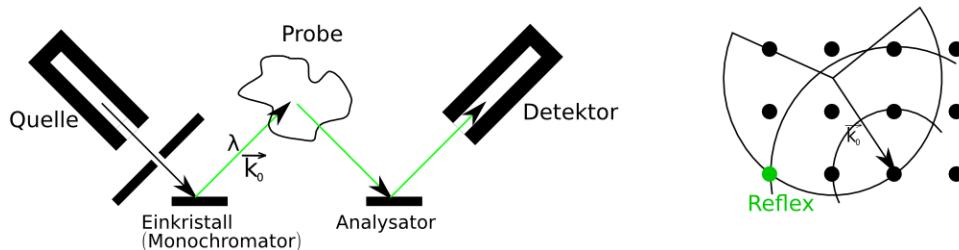


- Ewald-Kugel hat “dicke Haut”
- viele Reflexe gleichzeitig

Anwendungen:

- Orientierung der Symmetriechse
- Ist die Probe wirklich ein Einkristall

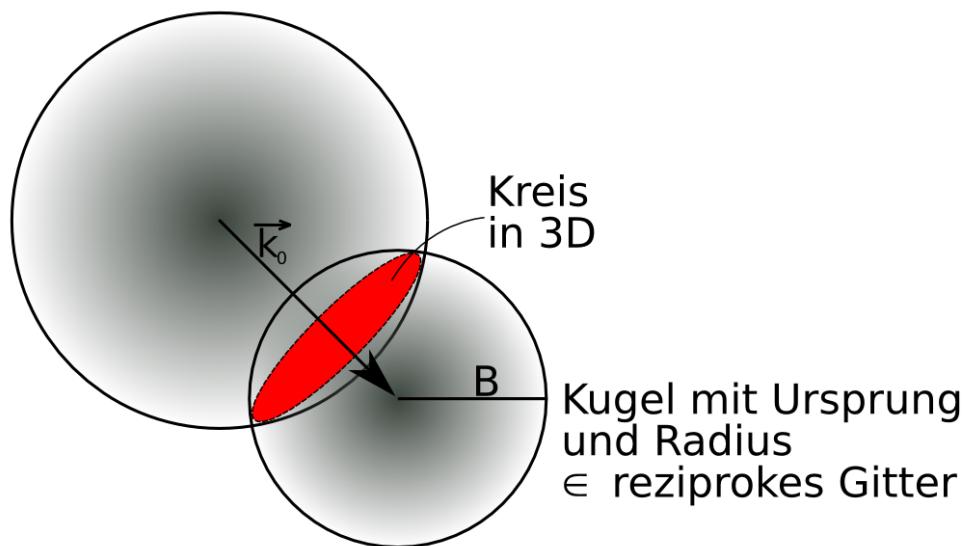
- Drehkristallverfahren: monochromatische Strahlung, und Kristall ist gedreht



Einkristall ermöglicht die Drehung von  $\vec{k}_0$

- Debye-Scherer-Verfahren: monochromatische Strahlung

- monochromatische Strahlung
- Pulver oder feinkörniger Pulverkristall



$\vec{B}$  dreht um  $4\pi$  Raumwinkel  $|\vec{B}| \leq 2|\vec{k}_0|; \frac{\Delta \vec{k}_0}{\vec{k}_0} \approx 10^{-4}$

pic 5 TODO

- ein bestimmter Reflex in alle Richtungen vorhanden
- Gitterkonstanten-Messung  $\frac{\Delta a}{a} \approx 10^{-5}$

## Chapter 4

# Strukturelle Defekte 0D,1D,2D

### 0D-Defekte - Punktdefekte

A - Leerstelle (Schottky-Defekte) B - Zwischengitteratom C' - Interstitueller Fremdatom C'' - substitutioneller Fremdatom

A Leerstellen → Schottky-Defekte, z.B NaCl  $\oplus \leftrightarrow \ominus$  Die Zahl der Leerstellen (im thermischen Gleichgewicht)

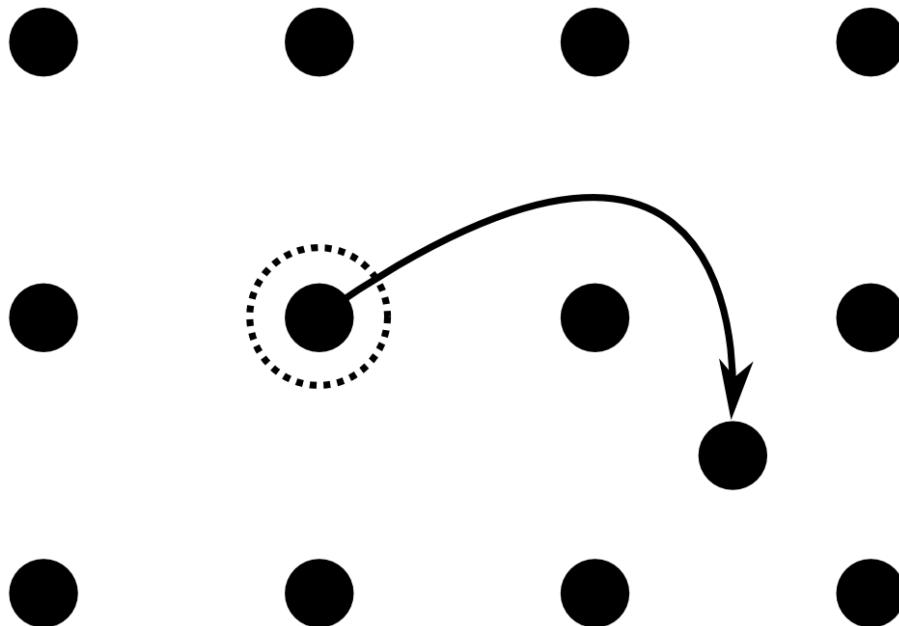
$$N_l = \underbrace{\text{const}}_{Ne^{\frac{S_L}{k_B}}} \cdot e^{-\frac{E_L}{k_B T}}$$

$E_L$  ist die Energie die zur Erzeugung einer Leerstelle gebraucht wird.  $S_L$  ist die Schwingungsentropie einer Leerstelle.  $\frac{S_L}{k_B} \approx 1$

$$\left. \frac{N_L}{N} \right|_{1000K} \approx 10^{-5}; \quad \left. \frac{N_L}{N} \right|_{300K} \approx 10^{-17};$$

Volumenänderung bei höheren Temperaturen  $T \rightarrow T_c : \frac{\Delta V(T)}{V} - 3 \frac{\Delta a}{a} \approx N_L(T)$  mit  $T_C$ -Temperatur-Schmelzpunkt. Farbzentren (F-Zentren): NaCl: Cl- Leerstellen ( $e^-$ ) gelb-braune Färbung

A Zwischengitteratome Zwischengitteratome sind starke Verzerrung des Gitters. In Ionenkristallen ist die Energie von Zwischengitteratome in der selben Ordnung wie die Leerstellen  $E_{zw.} \propto E_L$   
Frenkel-Defekt



### C Fremdatome

$C'$  interstitielle F.A.  $C''$  substitutionelle F.A.

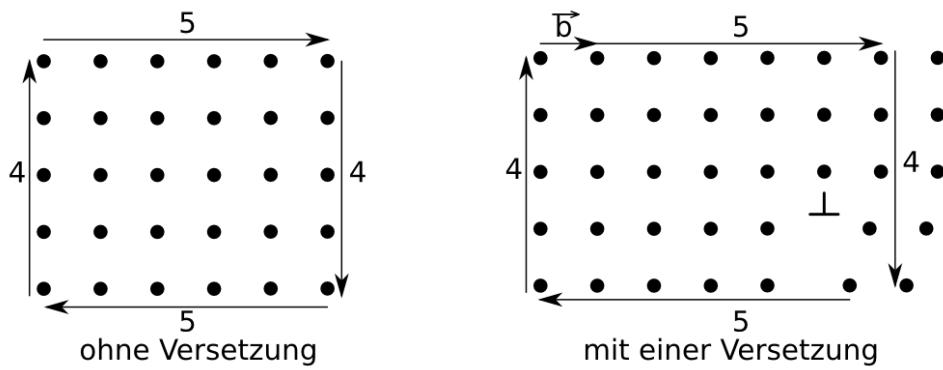
Si-Dotierung: z.B:  $S_i^{4+} \rightarrow Ga^{3+}$ ,  $S_i^{4+} \rightarrow P^{5+}$

Experimentelle Methoden:

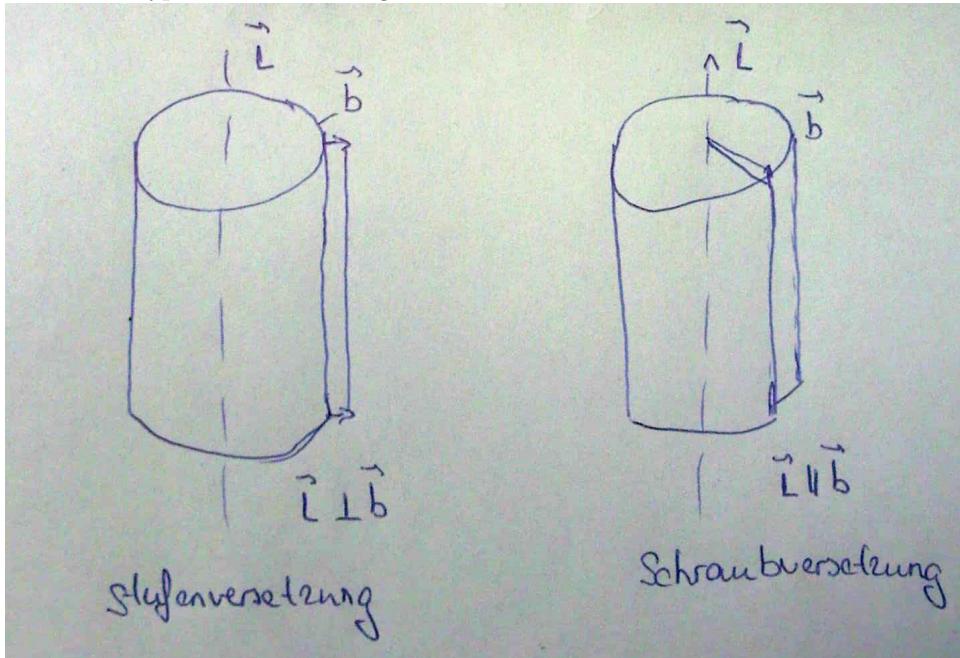
- ESP = Elektronenspinresonanz + Optik
- NMR = Kernspinresonanz + Optik

## 4.1 Ausgedehnte Defekte: 1D - Defekte

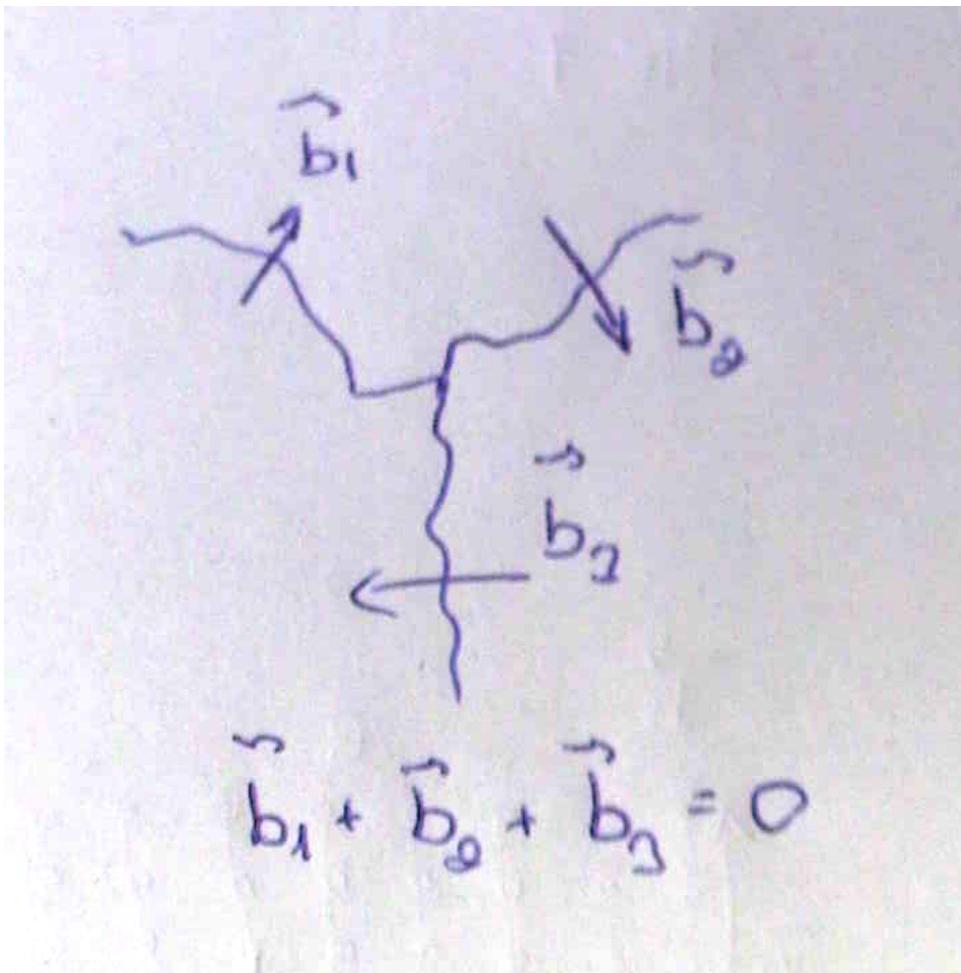
Versetzungen (engl. dislocations) sind für Mechanische Eigenschaften von Festkörpern verantwortlich.



$\vec{b}$  - Burgers-Vektor  $\perp$  - Stufenversetzung  
zwei Grundtypen von Versetzungen



Versetzungsknoten



$\vec{b}_1 + \vec{b}_2 + \vec{b}_3 = 0$  (ähnlich zu Kirchoff).

$\top \perp$  - Dipol

$\top \perp \top \perp \top \perp \top$  - Multipols

Versetzungen: a) v. Oberfläche b) Versetzungsenergie

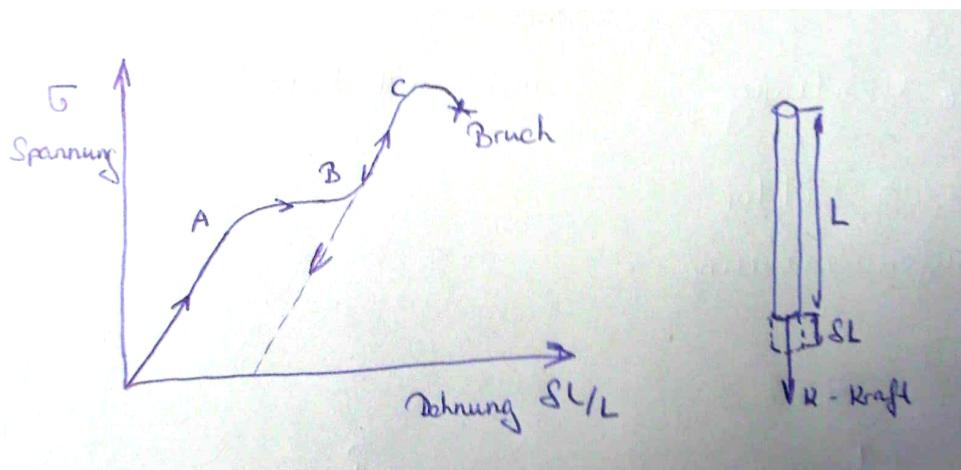
Experimentelle Beobachtung durch chemisches Ätzen von Probenoberflächen. (Beobachtung mit Rasterelektronenmikroskop SEM 1944).

Kristallwachstum (Whiskers) Plastische Deformationen

$$\vec{F} = (\vec{\sigma} \cdot \vec{b}) \times \vec{L}$$

$\vec{F}$ -Versetzungstensor

## 4.2 Einkristal: Mechanische Festigkeit



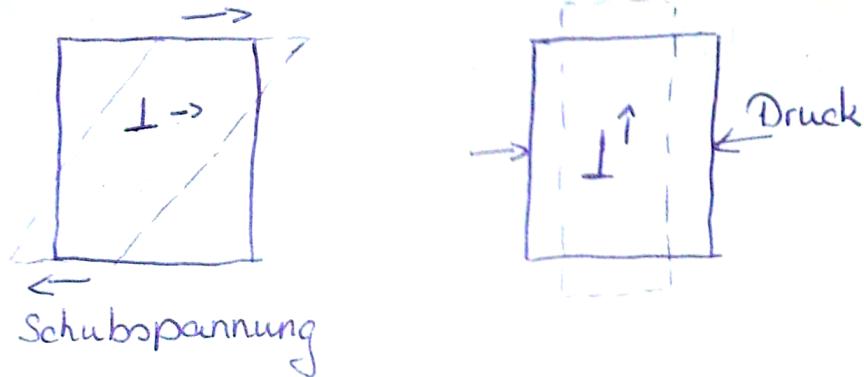
$$\sigma = \underbrace{E}_{\text{Elastizitätsmodul}} \frac{\delta L}{L}$$

Erst ist die Spannung proportional zur Dehnung (Hooksche Gesetze). Der Bereich zwischen A und B wird Dehnung größer ohne größer werden von Spannung. Hier finden Versetzungen statt.

A-B Plastische Deformation B-C Verfestigung

Einkristalle  $\approx 10^2 - 10^5$  Versetzungen/cm<sup>2</sup> Kalt verformte Metalle  $\approx 10^{12}$  Versetzungen/cm<sup>2</sup>

### 4.3 Plastische Deformationen



$$\vec{F}(\sigma \cdot \vec{b}) \times \vec{L}$$

Whiskers (engl.) = Vibrissen (lange Stäbchen mit Versetzung)

2D Defekte: Korngrenzen = Bereiche zu Kristallite (Polykristalle)

Kleinwinkelkorngrenzen

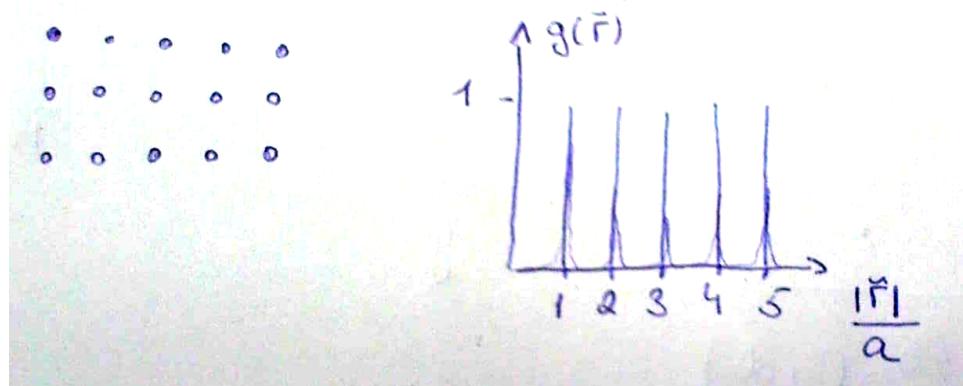


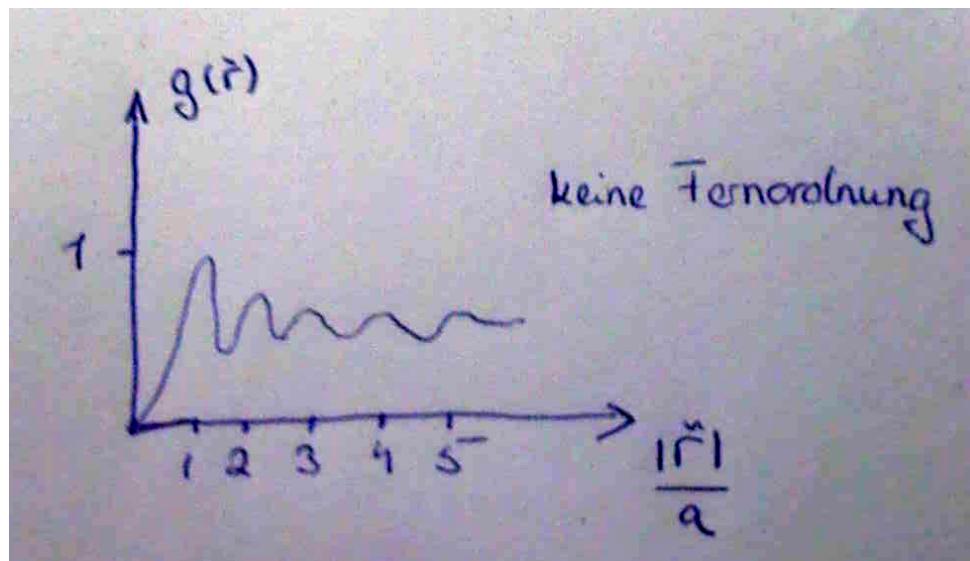
Stapelfehler: fcc und hcp A B C A B C—A B—A B—A B C...

### 4.4 Amorphe Materialien

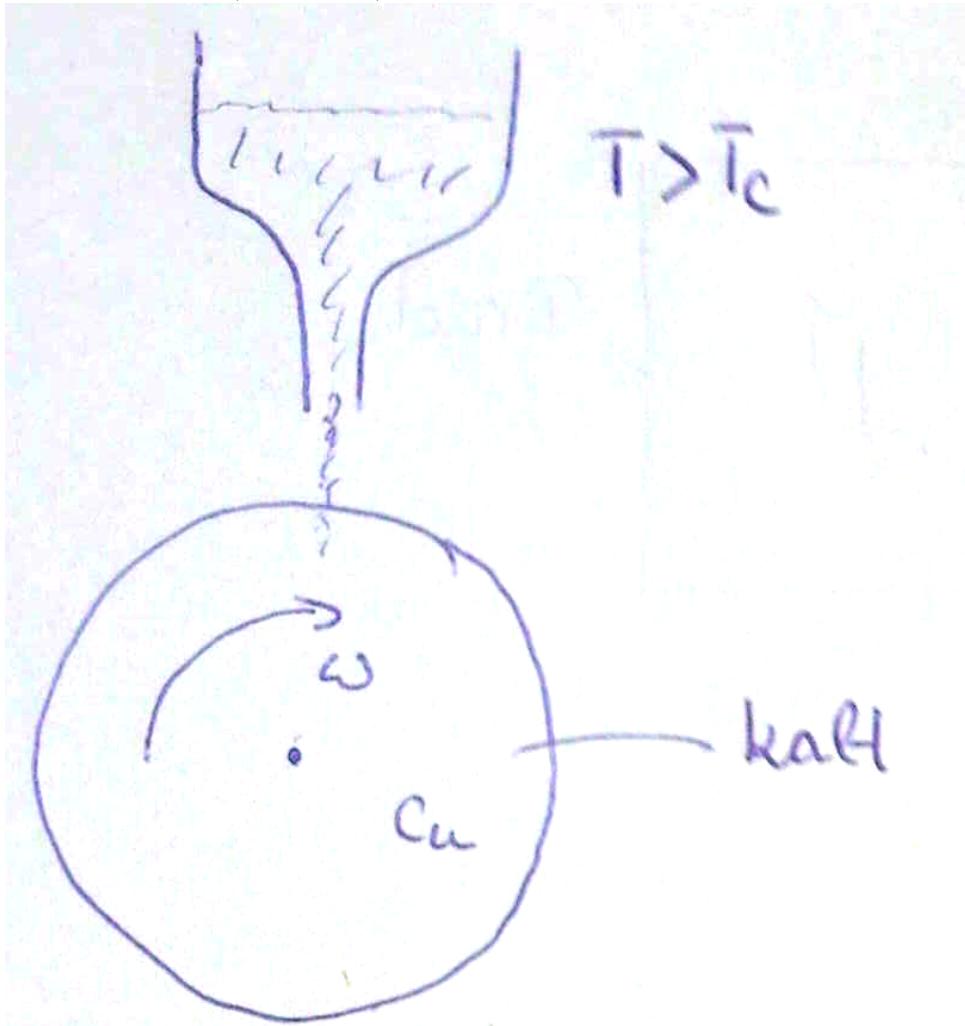
Paarverteilungsfunktion einer Atomsorte

$$g(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{n_0^2} \langle n(\vec{r}_1) \cdot n(\vec{r}_2) \rangle$$





Amorphe Festkörper  
keine Fernordnung (metabstabil)



Festplatten sind von amorphen magnetischen Material gemacht. In Flüssiger Form wird das Material auf eine rotierende disk getropft und erstarrt dort.

Anwendungen:

- Festplatten
- $\alpha$ -Si (Solarzellen)

# Chapter 5

## Elastische Eigenschaften

$\vec{r}$  nach Deformation  $\rightarrow \vec{r} + \vec{U}(\vec{r})$  mit  $\vec{U}$ -Verformung. Die Freie Energie:

$$\mathcal{F} = \int_V d\vec{r} \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \underbrace{E_{\alpha\beta\gamma\delta}}_{\text{Tensor}} \frac{\partial U_\alpha(\vec{r})}{\partial r_\beta} \cdot \frac{\partial U_\gamma(\vec{r})}{\partial r_\delta}$$

$E_{\alpha\beta\gamma\delta} \rightarrow 81 = 3^4$  Komponenten: Symmetrie mit 45 unabhängigen Komponenten  $\alpha\beta \leftrightarrow \gamma\delta$  ändert sich nicht unter Drehung von nicht deformierte Festk.

$E_{\alpha\beta\gamma\delta} - E_{\beta\alpha\gamma\delta} + E_{\alpha\beta\delta\gamma} + E_{\beta\alpha\delta\gamma} = 0$ ; nur 21 Komponenten.  
Dehnungstensor (strain tensor):

$$e_{\alpha\beta} = e^{\leftrightarrow} = [e] = \frac{1}{2} \left[ \frac{\partial U_\alpha(\vec{r})}{\partial r_\beta} \cdot \frac{\partial U_\gamma(\vec{r})}{\partial r_\gamma} \right]$$

Spannungstensor:

$$\sigma_{\alpha\beta} = \sigma^{\leftrightarrow} = [\sigma] = \sum_{\alpha\beta} \underbrace{C_{\alpha\beta\gamma\delta}}_{\text{elastizitaetstensor}} e_{\gamma\delta}$$

$$\mathcal{F} = \sum_{\alpha\beta} \int \vec{r} \frac{1}{2} e_{\gamma\delta} \sigma_{\gamma\delta}$$

$$C_{\alpha\beta\gamma\delta} = \frac{1}{4} (E_{\alpha\beta\gamma\delta} + E_{\beta\alpha\gamma\delta} + E_{\alpha\beta\delta\gamma} + E_{\beta\alpha\delta\gamma})$$

Arbeit = Länge \* Kraft

### 5.1 Elastische Konstanten für kubische Kristalle

$$C_{\alpha\alpha\alpha\alpha} \stackrel{\text{def}}{=} C_{11}$$

$$C_{\alpha\alpha\beta\beta} \stackrel{\text{def}}{=} C_{12}$$

$$C_{\alpha\beta\alpha\beta} \stackrel{\text{def}}{=} C_{44}$$

für isotropen Materialien  $C_{11} - C_{12} = 2C_{44}$  nur 2 unabhängige Komponenten  
Lamé-Konstanten  $\lambda \stackrel{\text{def}}{=} C_{12}$ ;  $\mu \stackrel{\text{def}}{=} C_{44}$

$$\mathcal{F} = \frac{1}{2} C_{11} (e_{xx}^2 + e_{yy}^2 + e_{zz}^2) + \frac{1}{2} C_{44} (e_{yz}^2 + e_{zx}^2 + e_{xy}^2) + C_{12} (e_{yy}^2 e_{zz}^2 + e_{zz}^2 e_{xx}^2 + e_{xx}^2 e_{yy}^2)$$

Volumen-Kompression:  $e_{xx}^2 = e_{yy}^2 = e_{zz}^2 = \frac{1}{3}\delta$ ;  $\mathcal{F} = \frac{1}{6}(C_{11} + C_{12})\delta^2$ ;

Kompressionsmodul:  $B \stackrel{\text{def}}{=} \frac{C_{11} + 2C_{12}}{3} = \frac{3\lambda + 2\mu}{3}$ ,  $\mathcal{F} = \frac{1}{2}B\delta^2$

Kompressibilität:  $\kappa = \frac{1}{B} = -\frac{1}{V} \cdot \frac{dV}{dp}$

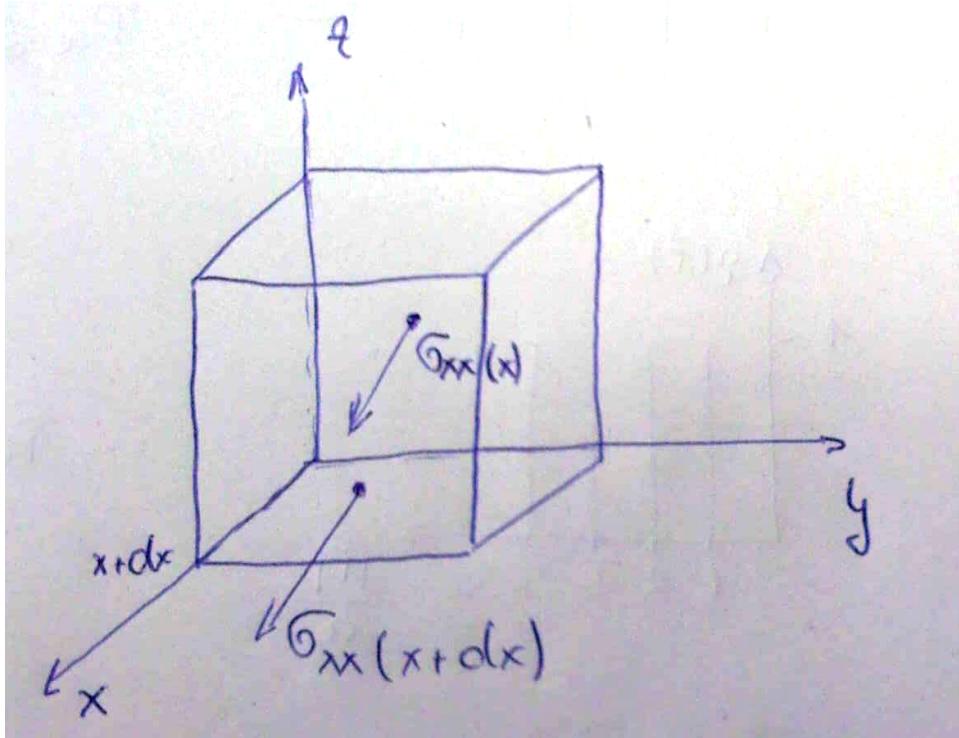
Elastizitätsmodul (Youngscher Modul)  $E = \frac{\text{Spannung}}{\text{Dehnung}} \approx \frac{d\sigma}{de} = \frac{\mu(3\lambda + 2\mu)}{\lambda + \mu}$

## 5.2 Konstanten für kubische Kristalle

$$\text{Elastizitätskraft: } f_\alpha(\vec{r}) = \rho \ddot{u}_\alpha(\vec{r}) = \sum_\beta \frac{\partial \sigma_{\alpha\beta}(\vec{r})}{\partial r_\beta}$$

## 5.3 Schallwellen

- longitudinale  $\vec{q}$  Wellenvektor.  $\vec{q} \parallel \vec{u}$
- transversale  $\vec{q} \perp \vec{u}$



$$df_x = \sigma_{xx}(x + dx) - \sigma_{xx}(x) dx dz = \frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x} dx dy dz$$

$$\rho \frac{\partial^2 U_x}{\partial t^2} = \frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x}$$

$$\sigma_{xx} = O_{11} e_{xx} = C_{11} \frac{\partial U_x}{\partial x}$$

$$\Rightarrow \rho \frac{\partial^2 U_x}{\partial t^2} = C_{11} \frac{\partial^2 U_x}{\partial x^2}$$

allgemeine Form

$$\rho \frac{\partial^2 U_x}{\partial t^2} = \sum_{\beta\gamma\delta} C_{\alpha\beta\gamma\delta} \frac{\partial U_\delta}{\partial r_\beta \partial r_\gamma}$$

Lösung:

$$U_\alpha = U_{o\alpha} \exp(-i\omega t + i\vec{q} \cdot \vec{r})$$

f kubische Kristalle

$$\rho \frac{\partial^2 U_x}{\partial t^2} = C_{11} \frac{\partial^2 U_x}{\partial x^2} + C_{44} \left( \frac{\partial^2 U_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 U_x}{\partial z^2} \right) + (C_{12} + C_{44}) \left( \frac{\partial^2 U_y}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 U_z}{\partial x \partial z} \right)$$

Nach Symmetrie: zyklische Vertauschung x,y,z →

$$\rho \frac{\partial^2 U_y}{\partial t^2} = \dots$$

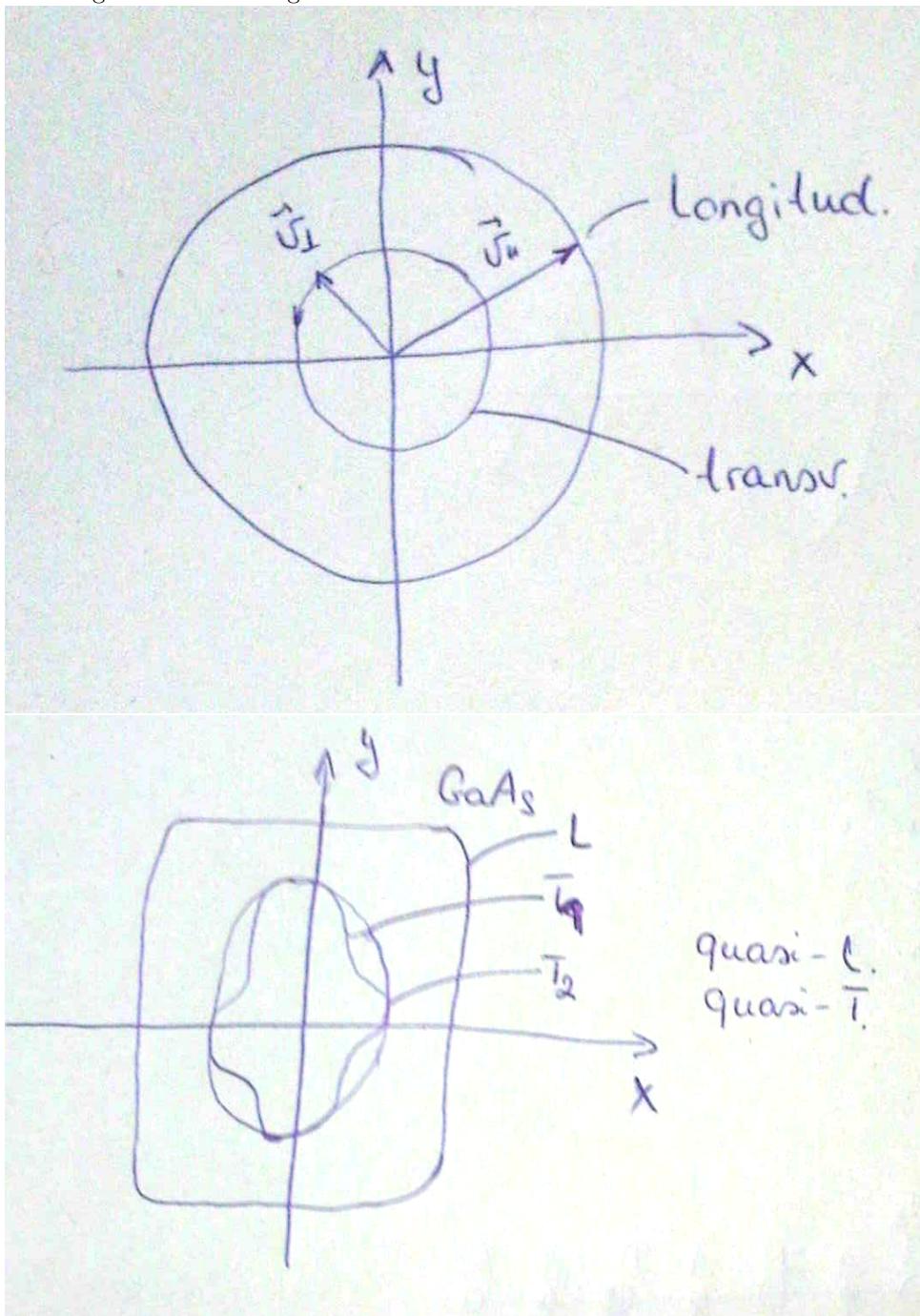
$$\rho \frac{\partial^2 U_z}{\partial t^2} = \dots$$

Dispersionsrelation:  $\omega_\alpha = v_\alpha \cdot q$ , 3 Modedn  $\forall$  Richtung 1 || (Longitudinale) + 2  $\perp$  (Transversale).  
für isotropes Medium

$$\vec{u}_1 \parallel \vec{q}; v_{||} = \frac{\omega_{||}}{q} \sqrt{\frac{C_{11}}{\rho}} \text{ Elastizitätsmodul}$$

$$v_{\perp} = \frac{\omega_{\perp}}{q} \sqrt{\frac{C_{44}}{\rho}} \begin{cases} \vec{u}_2 \perp \vec{q} \\ \vec{u}_3 \perp \vec{q} \end{cases} \text{ Schubmodul}$$

Messungen [100] →  $C_{11}, C_{44}$ ; [110]  $C_{12}$   
Richtungsabh. von Schallgeschw.

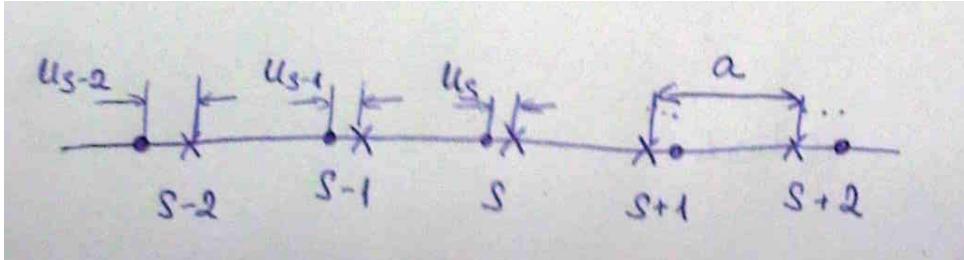


# Chapter 6

## Gitterdynamik und Phononen

### 6.1 Gitterschwingungen

1D Kette mit einatomiger Basis.



Bewegungsgleichungen:

$$M \frac{d^2 u_s}{dt^2} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n (u_{s+n} - u_s)$$

mit  $c_n$  als Kraftkonstante

Lösung:  $u_{s+n} = v e^{-i\omega t + i g n a}$

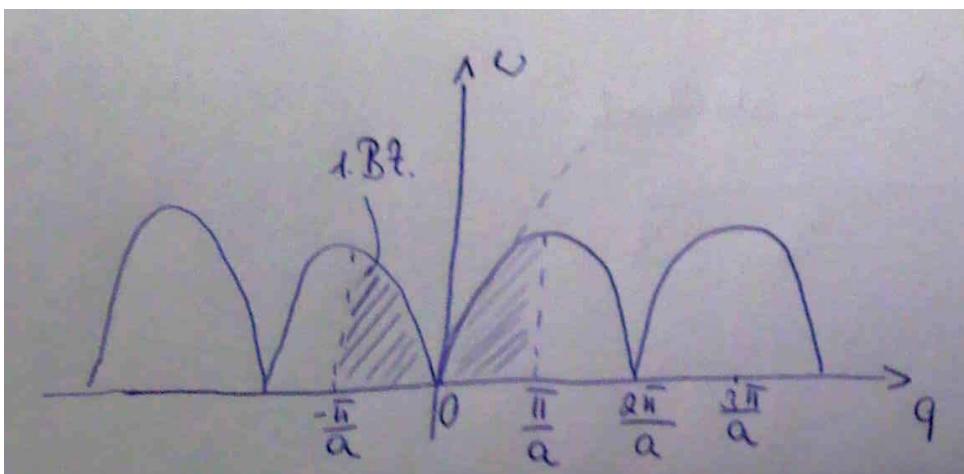
$$\omega^2 M = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n (1 - e^{iqna})$$

nach Symmetrie  $c_{-n} = c_n$

$$\omega^2 = \frac{1}{M} \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n (2 - e^{iqna} - e^{-iqna}) = \frac{2}{M} \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n (2 - \cos(qna))$$

$c_1 \gg c_n$ , für  $n \geq 2$ , nur nächst. Nachbarn  $\rightarrow \omega^2 = \frac{2c_1}{M} (1 - \cos(qa)) = \frac{4c_1}{M} (\sin^2(\frac{qa}{2}))$

$$\omega = 2 \sqrt{\frac{c_1}{M}} \left| \sin \frac{qa}{2} \right|$$



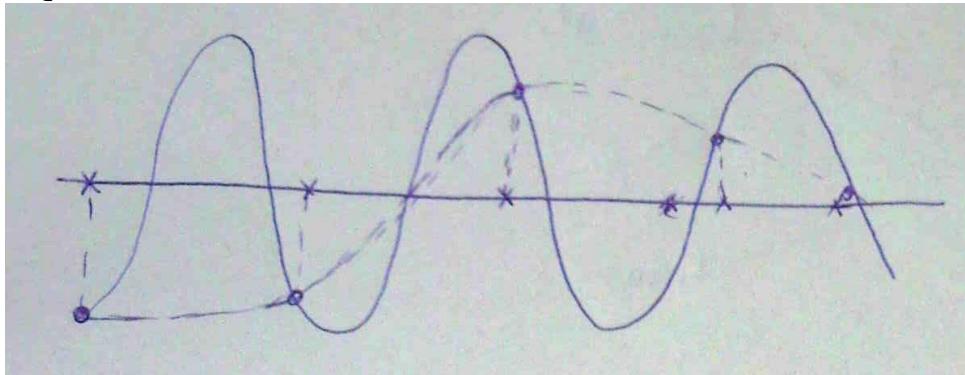
$$\text{bei } c_2 \neq 0; \omega^2 = \frac{4c_1}{M} \left[ \sin^2 \frac{qa}{2} + \frac{c_2}{c_1} \sin^2(qa) \right]$$

$$\frac{u_{s+1}}{u_s} = e^{iqa} \rightarrow \text{Phasenunterschied}$$

Wir betrachten den Bereich  $-\pi < qa < \pi$ . Reduktion auf die 1. Brillouin-Zone;

$$\underbrace{q'}_{\text{außerhalb 1 BZ}} = \underbrace{q}_{\text{1 BZ}} + \underbrace{\frac{2\pi N}{a}}_{\text{mit}}$$

$N \in \mathbb{Z}$



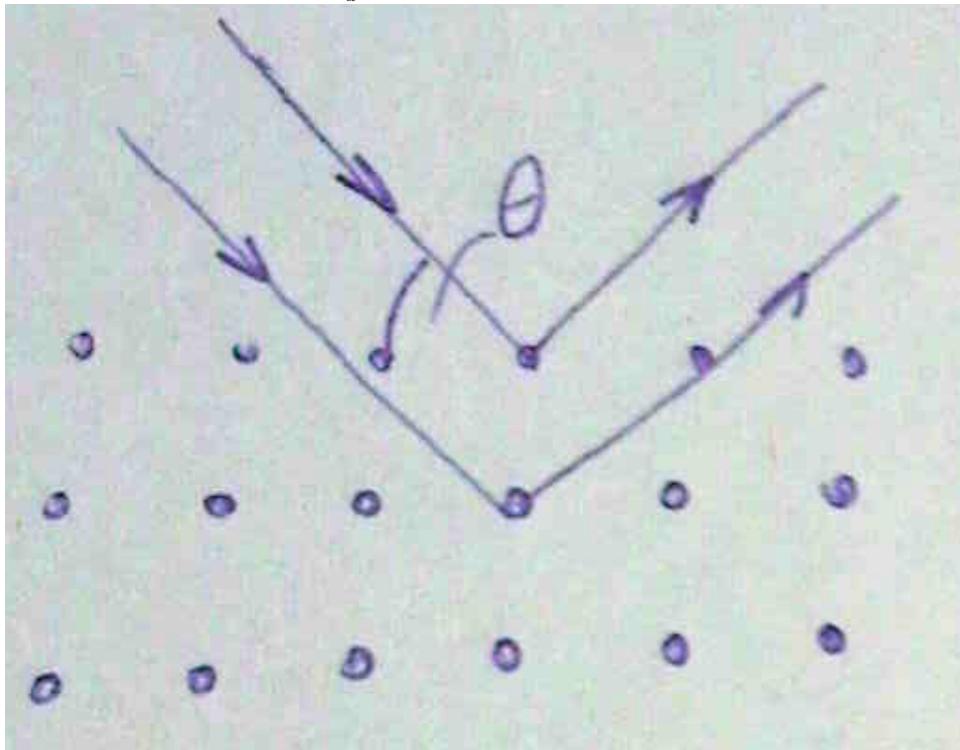
$$\frac{u_{s+1}}{u_s} = e^{iqa} \cdot e^{2\pi N}$$

- Gruppengeschwindigkeit:  $v_g = \frac{d\omega}{dq}$  (entspricht den Energietransport) ( $v_g = 0$  eine Stehende Welle, Schwingung in Gegenphase, kein Energietransport)
- Phasengeschwindigkeit:  $v_{Ph} = \frac{\omega}{q}$
- Langwelliger Grenzfall:  $q \rightarrow 0; \lambda \rightarrow \infty$

$$\begin{aligned} \omega^2 &= \frac{2}{M} \sum_{n=1}^{\infty} c_n (1 - \underbrace{\cos(qna)}_{\approx 1 - \frac{x^2}{2} + \dots}) \approx \frac{q^2 a^2}{M} \sum_{n=1}^{\infty} n^2 s_n \end{aligned}$$

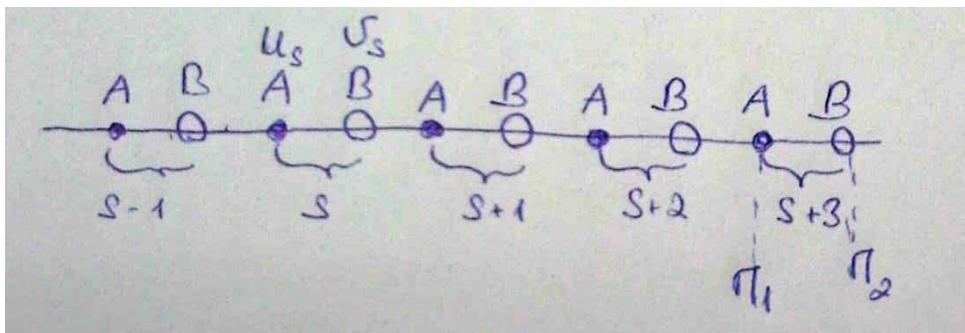
$$c_{11} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{n^2}{a} c_n^2$$

kurzwelliger Grenzfall:  $|q| \approx \frac{\pi}{a}; \lambda = 2a$



$$2ds \sin \theta = \lambda; d = a; \theta = \frac{\pi}{2}$$

## 6.2 Gitter mit 2-Atomiger Basis



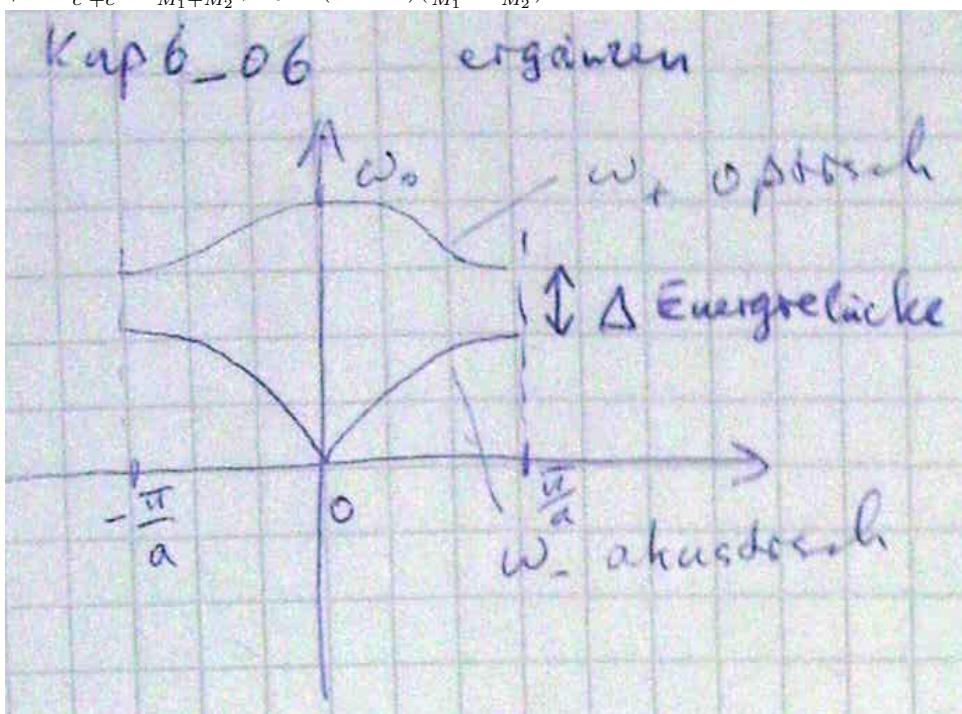
$$M_1 \frac{d^2 u_s}{dt^2} = c'(v_s - u_s) - c''(u_s - v_{s-1})$$

$$M_2 \frac{d^2 v_s}{dt^2} = c''(v_{s+1} - v_s) - c'(v_s - u_s)$$

Lösung  $u_s = ue^{-i\omega t + iqsa}$ ;  $v_s = ve^{-i\omega t + iqsa}$

$\det|...| = 0$ ; Eigenfrequenzen:  $\omega_{\pm}^2 = \frac{\omega_0^2}{2} [1 \pm \sqrt{1 - \gamma^2 \sin^2 \frac{qa}{2}}]$

$$\gamma = e^{\frac{\sqrt{c'c''}}{c'+c''}} \cdot \frac{\sqrt{M_1 M_2}}{M_1 + M_2}; \omega_0 = (c' + c'') \left( \frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right)$$



a) Für  $q \rightarrow 0$ ;  $\omega_0 = \frac{2C}{\mu}$ ;  $c = c' = c''$ ;  $\mu^{-1} = \mu_1^{-1} + \mu_2^{-1}$

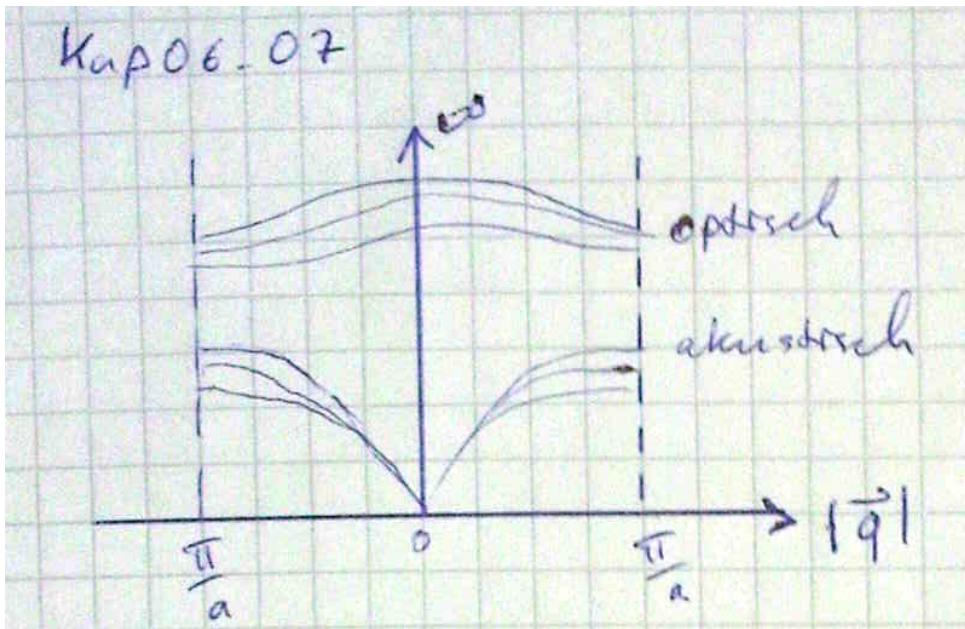
$\frac{u}{v} = -\frac{\mu_2}{\mu_1}$ : Schwingung in Gegenphase; Ionenkristalle: oszillierendes elektrisches Dipolmoment

b) Für  $|q| \rightarrow \frac{\pi}{a}$ ;  $M_1 < M_2$ ;  $\omega^2 = \frac{2c}{M_1}$ ;  $\omega^2 = \frac{2c}{M_2} \Rightarrow \frac{v}{u} = 0$  bzw  $\frac{u}{v} = 0$

Frequenzlücke → 'verbotene' Zone

3D Kristalle (mit P Atomen pro E.Z.)

- Es gibt 3 akustische Zweige mit 1 longitudinale und 2 transversale
- (3P-3) optische Zweige



### 6.3 Quantisierung elastischer Wellen

List (EM-Feld) → Photonen → Teilchen Schall (elastisches Feld) → Phononen → Quasiteilchen

Quasiimpuls:  $\hbar\vec{q}$  Energie:  $E_{\vec{q}} = \hbar\omega_{\vec{q}}$

Quasiimpuls und seine Energie ist definiert nur in der 1.B.Z.

$$E_{\vec{q}} = \hbar(n_{\vec{q}} + \frac{1}{2})\omega_{\vec{q}}$$

Die Eigenwerte sind quantisiert

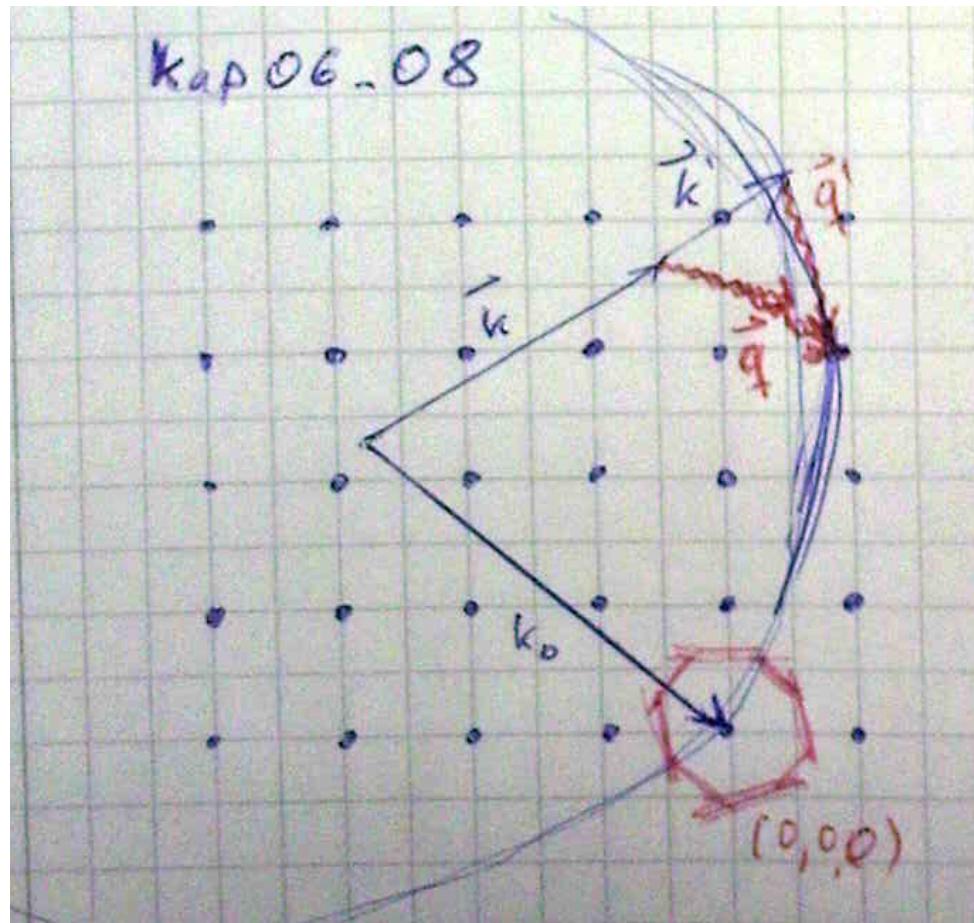
$\frac{1}{2}\hbar\omega_{\vec{q}}$  ist die Nulpunktenergie des Schwingungszustandes

Energieverluste (inelast. Streuung)

Die Energieverluste könnten wir entweder klassisch (komplexe  $\omega, k$ ). Damit entspricht der Imaginäre-Teil den Verlusten.

Oder die Energieverluste werden quantenmechanisch beschrieben (die Zahl der Teilchen ist reduziert). Inelastische Streuung durch Phononen representiert.

$$\text{Impuls } \underbrace{\vec{k}_0}_{\text{Photon}} + \underbrace{\vec{B}}_{\text{ein Vektor des reziproken Gitters}} = \vec{k} \pm \underbrace{\vec{q}}_{\text{Phonon mit Wellenvektor } \vec{q}} ; \text{ Energie } \hbar\omega_0 = \hbar\omega \pm \hbar\omega_q$$



Ewald Konstruktion

$\oplus$  ein Phonon erzeugt  $\ominus$  ein Phonon absorbiert  
Wiederholung mögliche Streuteilchen (Messsonden)

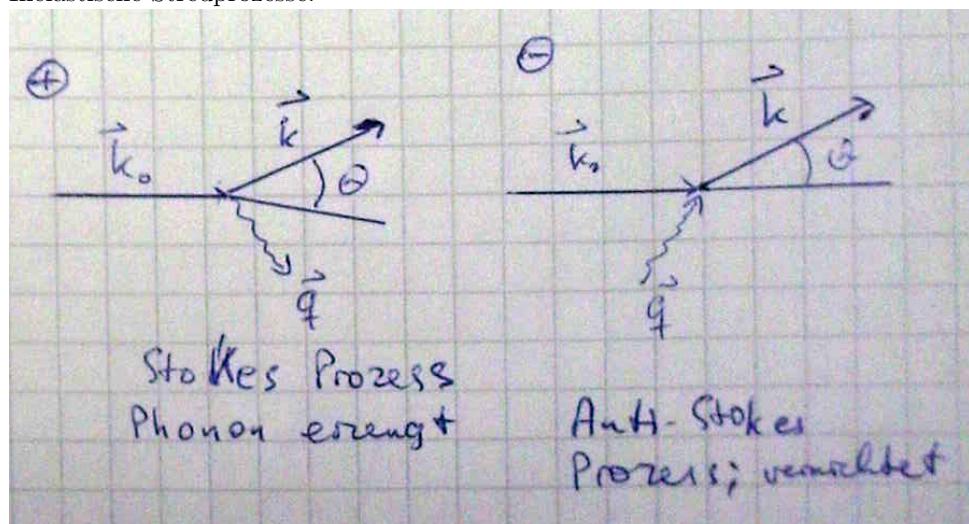
- Röntgen-Photonen:  $E \approx 10\text{keV}$ ; ! Phononen:  $E_g \approx 10^{-2}\text{eV}$
- Elektronen:  $E \approx 100\text{eV}$ ; Nachteil die Eindringtiefe ist gering
- Neutronen:  $E = \frac{p^2}{2m} = \frac{h^2}{2m\lambda^2} \approx 0,1\text{eV}$ ; können durch den ganzen Körper praktisch ungehindert durchfliegen; können mit Phononen interagieren (inelastische Streuung).

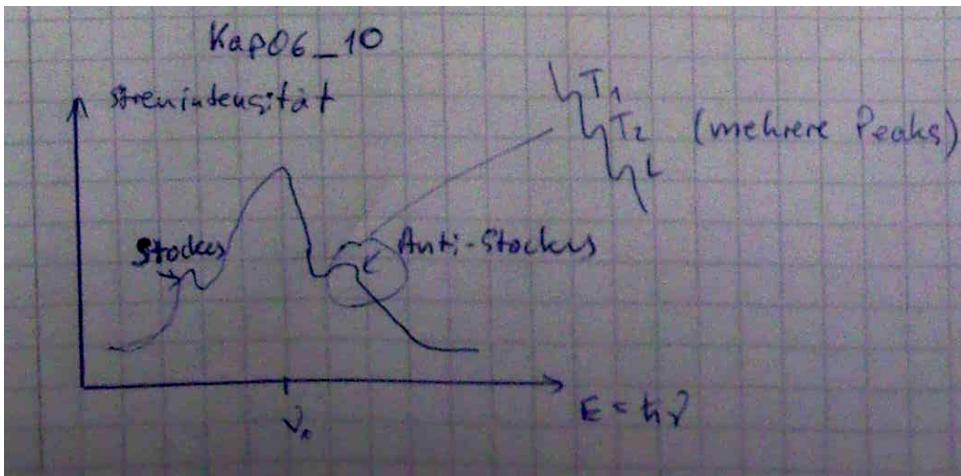
Lichtstreuung: sichtbares Licht mit  $\lambda_\nu >> a$ ;  $|\vec{k}_0| \ll |\vec{B}| \approx \frac{2\pi}{a}$ , nur 1.B.Z.

Impulserhaltung:  $\vec{k}_0 = \vec{k} \pm \vec{q}$

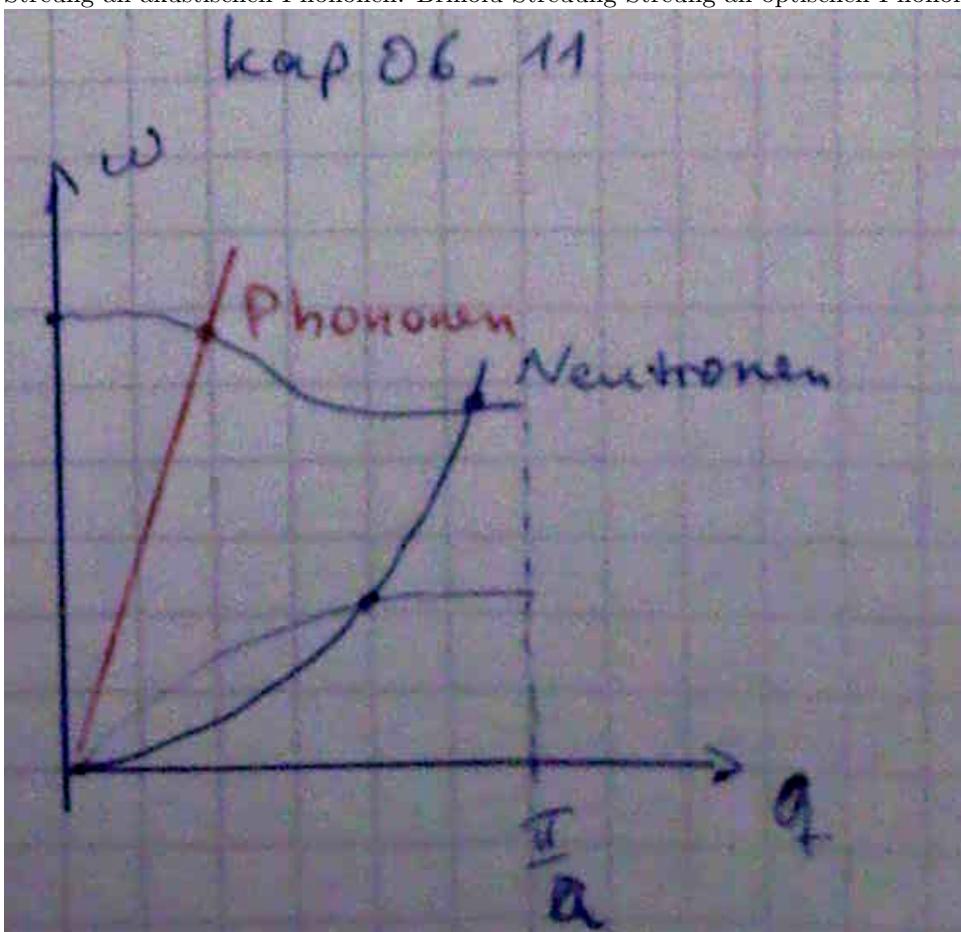
Elastische Streuung: Rayleigh-Streuung  $\vec{k} = \vec{k}_0$ ;  $\vec{q} = 0$

Inelastische Streuprozesse:





Streuung an akustischen Phononen: Brilloiu-Streuung Streuung an optischen Phononen: Raman Streuung



## 6.4 Zustandsdichte der Phononen

Theorie eines 3D-Kristalls vorgeschlagen von Born-Karman, 1912 (klassische Theorie)

$$\vec{u}(x, y, z) = \vec{u}(x + L_x, y + L_y, z + L_z); \text{ periodische Randbedingung}$$

$$\text{Wellen (Moden): } \vec{u} = \vec{u}_0 \exp[-i(\omega t - q_x x - q_y y - q_z z)]$$

Periodizität der Atomaren Auslenkung bei  $q_\alpha = m_\alpha \frac{2\pi}{L_\alpha}; \alpha = x, y, z$  und  $m_\alpha$  ganzzahlige Quantenzahl.

$$e^{iq_\alpha L_\alpha} = 1$$

bei einem Kristall mit  $N_\alpha$  Elementarzellen (E.Z.) in  $\alpha$ -Richtung haben wir insgesamt  $N_x, N_y, N_z = N$  E.Z. 3N Lösungen der Bewegungsgleichung; mit  $p$  Atome pro E.Z. gibt es  $3pN$  Lösungen der Bewegungsgleichung.

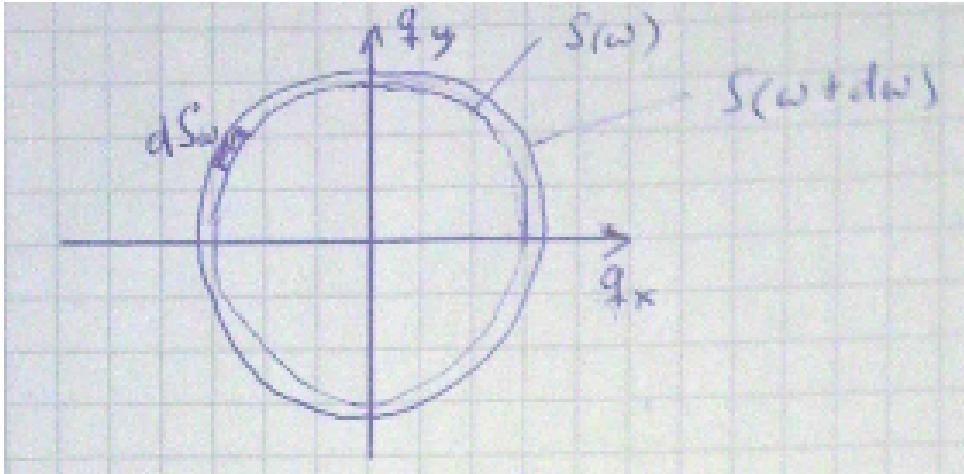
Alle erlaubten wellenvektoren liegen in 1.Brillouin-Zone (1.B.Z.)

'Dichte'  $D(q) \equiv \rho_q$  im reziproken Raum:

$$\rho_q = \frac{N}{(2\pi)^3/V_z} = \frac{NV_z}{(2\pi)^3} = \frac{V}{(2\pi)^3}$$

$V_z$ -Das Volumen der E.Z. des realen Gitters.

Zustandsdichte als Funktion der Frequenz  $D(\omega)$ : Anzahl von Zuständen pro Einheitsintervall der Frequenz  $\omega$



$$D(\omega) \cdot d\omega = \rho_q \int_{\omega}^{\omega+d\omega} d^3q = \rho_q \int_{\omega}^{\omega+d\omega} dS_{\omega} \cdot dq_{\perp}$$

$$\text{Gruppengeschwindigkeit: } v_g = \left| \frac{d\omega}{d\vec{q}} \right| = \left| \underbrace{\text{grad}_{\vec{q}} \omega}_{\equiv \nabla_{\vec{q}} \omega} \right| = \frac{d\omega}{dq_{\perp}}$$

$$D(\omega) \cdot d\omega = \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{\text{Schalde } \omega = \text{const}} \frac{dS_{\omega}}{v_g} \cdot d\omega$$

Für isotrope Kristalle:

$$D(\omega) \cdot d\omega = \frac{V}{(2\pi)^3} d\omega \frac{4\pi q^2}{v_g} = \frac{V}{(2\pi)^2} \frac{q^2}{v_g} d\omega$$

Die Zustandsdichte ist um so größer, je flacher die  $\omega(\vec{q})$  verläuft. Kritische Punkte → van-Hove-Singularitäten ( $v_g \rightarrow 0$ ). Häufigstes vorkommen von Zuständen.

$$3D: D(\omega) = \frac{V}{(2\pi)^2} \frac{q^2}{v_g}; 2D: D(\omega) = \frac{A}{(2\pi)^2} \frac{2\pi q^2}{v_g} = \frac{Ag}{2\pi v_g} \quad 1D: D_1(\omega) = \frac{L}{2\pi} \frac{2}{v_g} = \frac{L}{\pi v_g}$$

## 6.5 Spezifische Wärme

$$c = c_{Ges} \frac{N_A}{N}; N_A = 6,022 \cdot 10^{23}; N \text{ Elementarzellen E.Z.}$$

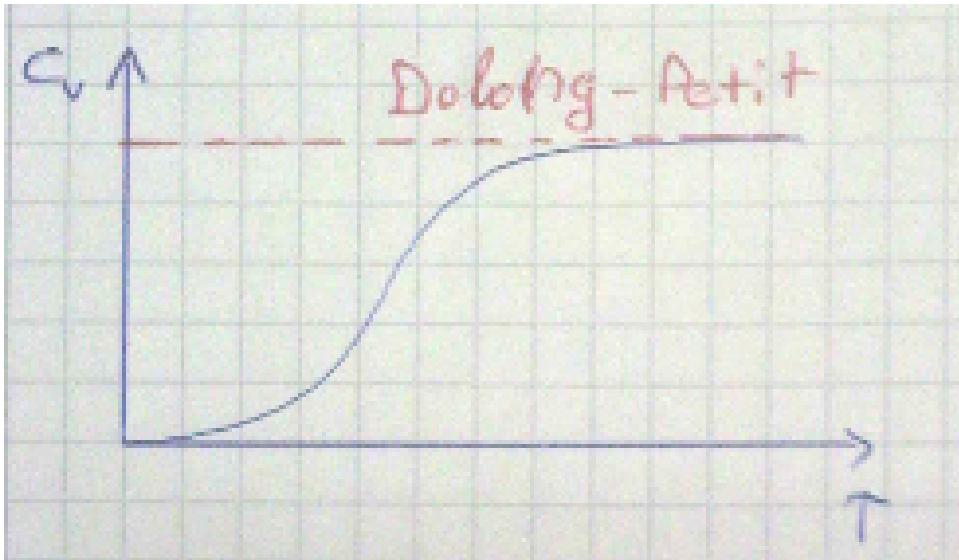
$$c|_{P=const.} c_p > c|_{V=const.} = c_V; \text{ Unterschied zwischen } c_p \text{ und } c_V \text{ ist in der Realität minimal.}$$

Klassische Theorie:  $c_V = \frac{\partial}{\partial T} U(T); U$ -innere Energie. Therm. Mittelwert der Energiewerte:  $U \equiv \langle E \rangle = \sum_i p_i \cdot E_i$ ;  $p_i$ -Wahrscheinlichkeit. Klassisch:

$$\langle E \rangle = \frac{\int E e^{-\frac{E}{k_B T}} d\Gamma}{\int e^{-\frac{E}{k_B T}} d\Gamma}$$

$$d\Gamma = dx \cdot dy \cdot dz \text{-Phasenraum}$$

harmonischer Oszillator:  $\langle E_{Osz} \rangle = k_B T$  3pN Gitterschwingungen:  $c_V = 3pNk_B$  Dulong-Petit-Gesetz (1819)



$$c_V = 3R = 3 \cdot 8,3 \frac{J}{mol \cdot K} = 24,9 \frac{J}{mol \cdot K} = const.; R\text{-univers. Gaskonstante}$$

Quantentheorie: Erste Erklärungsversuch von Einstein (1906) und zweiter und besserer Versuch von Debye (1912).

Zustand n mit  $E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$ ; Boltzmann-Verteilung:

$$p_k = \frac{e^{-\frac{E_n}{k_B T}}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{E_n}{k_B T}}} = e^{-\frac{n\hbar\omega}{k_B T}} \left[ 1 - e^{-\frac{\hbar\omega}{k_B T}} \right]$$

$$\text{Nenner} = e^{-\frac{\hbar\omega}{2k_B T}} \sum_{n=0}^{\infty} \left[ e^{-\frac{\hbar\omega}{2k_B T}} \right]^n = e^{-\frac{\hbar\omega}{2k_B T}} \sum_{n=0}^{\infty} \left[ 1 - e^{-\frac{\hbar\omega}{k_B T}} \right]^{-1}; \text{mit } \sum_0^{\infty} x^n = \frac{1-x^{n+1}}{1-x} \approx \frac{1}{1-x}; n \rightarrow \infty, x \rightarrow 0$$

$$U \equiv \langle E_n \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} p_n \cdot E_n = \left[ 1 - e^{-\frac{\hbar\omega}{k_B T}} \right] \hbar\omega \sum_{n=0}^{\infty} \left( n + \frac{1}{2} \right) \underbrace{\left[ 1 - e^{-\frac{\hbar\omega}{k_B T}} \right]}_x^n$$

$$\sum_n x^n n = x \frac{d}{dx} \sum_n x^n = \frac{x}{(1-x)^2}$$

$$\langle E_n \rangle = \hbar\omega \left[ \frac{1}{e^{-\frac{\hbar\omega}{k_B T}} - 1} + \frac{1}{2} \right]$$

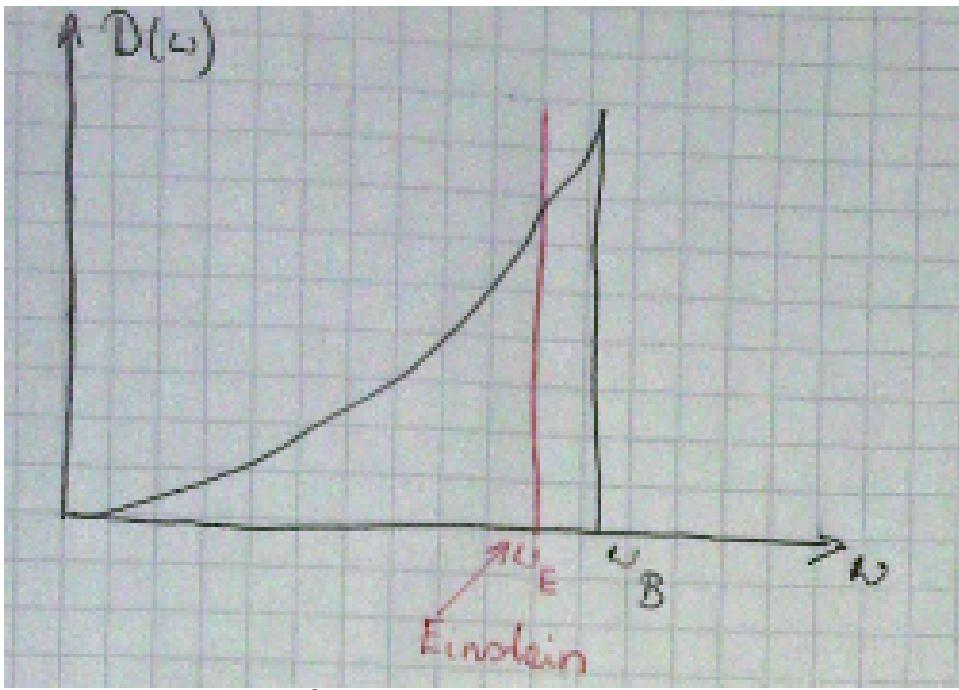
$$\text{mit } E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2}) \\ \langle n \rangle \frac{1}{e^{-\frac{\hbar\omega}{k_B T}} - 1}; \text{ Bose-Einstein Faktor; } E(\omega, T) = \hbar\omega[\langle n \rangle + \frac{1}{2}]$$

## 6.6 Debye-Näherung

Debye-Näherung kann man für isotrope Festkörper anwenden mit  $p = 1 \Rightarrow \omega = v_g; v = v_g$ . Betrachte nur akustische Phononen.

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

Zustandsdichte pro Phonenzweig (Ast)



$$N = \int_0^{\omega_D} \frac{V}{(2\pi)^2} \frac{\omega^2}{v^3} d\omega = \frac{V \omega_D^3}{6\pi^2 v^3}; \omega_D = \frac{v}{a} \sqrt[3]{6\pi^2}; \frac{V}{N} \approx a^3 - \text{Gitterkonstante}$$

$$\omega \propto vg$$

Abscheidefrequenz  $\omega_D \Rightarrow$  Debye-Frequenz.

$$\boxed{\omega_D = \frac{v}{a} \sqrt[3]{6\pi^2}}$$

$$D(\omega) = \frac{v\omega^2}{2\pi^2} \left( \frac{1}{v_L^3} + \frac{2}{v_T^3} \right) = \frac{3}{2\pi^2} \frac{\omega^2 v}{v_D^3}; \frac{3}{v_D^3} \equiv \frac{1}{v_L^3} + \frac{2}{v_T^3}; \text{ typisch } v_L \approx \frac{3}{2} v_T$$

Schwingungsenergie des Kristalls:  $v(T) = \int_0^\infty D(\omega) E(\omega, T) d\omega$

Spezifische Wärme:  $c_V = \frac{\partial v(T)}{\partial T}$ ;

$$v = \frac{v}{2\pi^2} \underbrace{\frac{1}{v^3}}_{\frac{3N}{v} \frac{6\pi^2}{\omega_D^3}} \int_0^\infty \omega^2 E(\omega, T) d\omega = \frac{9N}{\omega_D^3} \int_0^\infty \frac{\hbar\omega^3 d\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} - 1}$$

Debye-Temperatur:  $\theta_D = \frac{\hbar\omega_D}{k_B}$  mit  $y = \frac{\hbar\omega}{k_B T}$ , Debye-Formel:

$$c_V = 9Nk_B \left( \frac{T}{\theta_D} \right)^3 \int_0^{\theta_D/T} \frac{y^4 e^y dy}{(e^y - 1)^2}$$

Debye-Temperaturen:

$\theta_D, K$	C Diamant	Be	Si	Al	Cu	Ar	He
2230	1000	640	430	340	92	25	

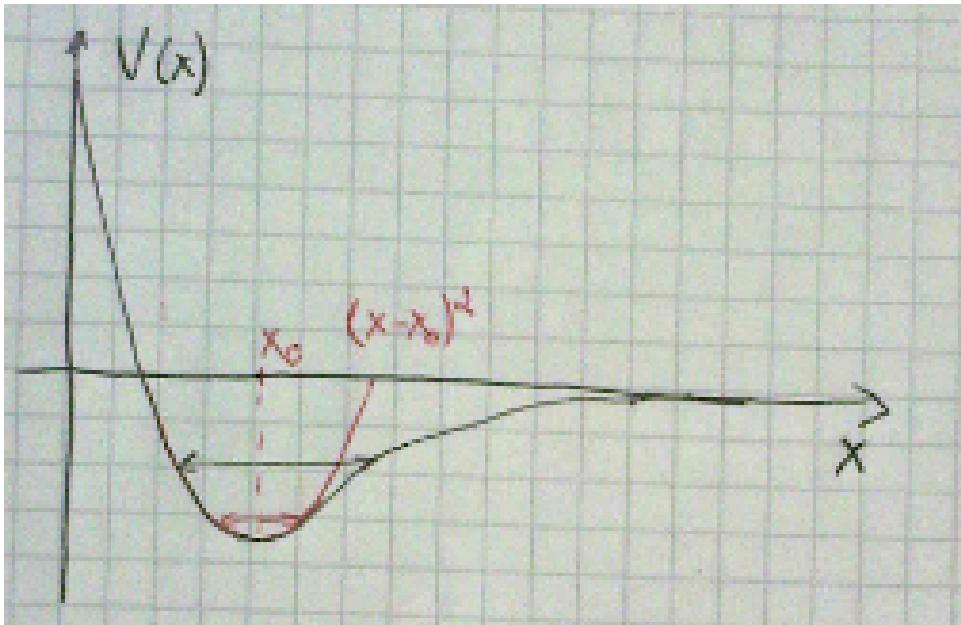
a)  $T \ll \theta_D$  tiefen Temperaturen  $\rightarrow$  Einstein-Theorie b)  $T \gg \theta_D$  hohen Temperaturen  $\rightarrow$  klassische Thermodynamik

$$\text{a): } y \rightarrow \infty, \int_0^\infty \frac{y^4 e^y dy}{(e^y - 1)^2} = \frac{4\pi^4}{15}; c_v = \frac{12\pi^4}{5} N k_B \left( \frac{T}{\theta_D} \right)^3 \approx T^3; T^3\text{-Gesetz}$$

$$\text{b): } y \rightarrow 0, \int_0^{\theta_D/T} \dots dy \approx \int_0^{\theta_D/T} \frac{y^4 \cdot 1}{(1+y-1)} dy = \int_0^{\theta_D/T} y^2 dy = \frac{1}{3} \left( \frac{T}{\theta_D} \right)^3, c_V = 3Nk_B, \text{ Dulong-Petit Gesetz.}$$

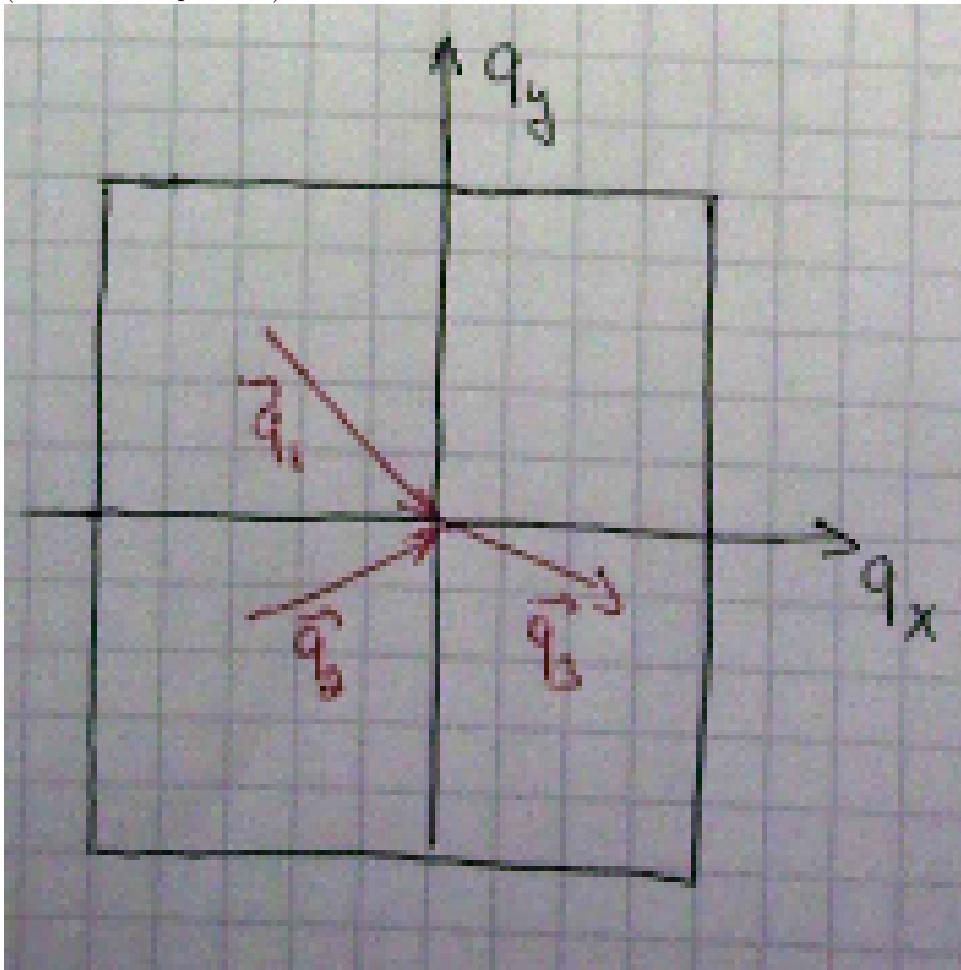
## 6.7 Anharmonische Effekte

Klassisch gesehen ein Anharmonischer Effekt ist eine Abweichung von harmonischen Potentialen.



Auslenkungen sind nicht mehr klein! dann bekommt man die anharmonische Effekte.

Quantenmechanisch die Anharmonischen Effekte kann man als Wechselwirkung zwischen Phononen beschreiben (Phononenstöße prozesse)



Normale Prozesse:  $\vec{q}_1 + \vec{q}_2 = \vec{q}_3$

Umklapp-Prozesse:  $\vec{q}_1 + \vec{q}_2 = \vec{q}_3 + \vec{B}$

## 6.7 Thermische Ausdehnung

anharmonische Terme

klassisch:  $U(x) \approx cx^2 - \underbrace{gx^3 - fx^4}_{\text{anharmonische Terme}} + \dots$ ; Auslenkung:  $\langle x \rangle = \frac{\int_0^\infty dx x e^{-\frac{U(x)}{k_B T}}}{\int_0^\infty dx e^{-\frac{U(x)}{k_B T}}}$  aus der Thermodynamik ergibt sich:

$$\rightarrow \langle x \rangle \approx \frac{3g}{4c^2} k_B T$$

Wärmeausdehnungskoeffizient:  $\alpha \equiv \frac{1}{l} \left( \frac{\partial l}{\partial T} \right)_p = \frac{1}{3} \frac{1}{v} \left( \frac{\partial v}{\partial T} \right)_p$ ;  $l \propto \langle x \rangle$ ;  $\left( \frac{\partial V}{\partial T} \right)_p = - \left( \frac{\partial V}{\partial p} \right)_T \cdot \left( \frac{\partial p}{\partial T} \right)_v$ ;  $\frac{1}{B} = - \frac{1}{V} \left( \frac{\partial V}{\partial p} \right)_T$   
 $\left( \frac{\partial V}{\partial T} \right)_p = \frac{V}{B} \left( \frac{\partial p}{\partial T} \right)_V$ ;

$$\boxed{\alpha = \frac{1}{3B} \left( \frac{\partial p}{\partial T} \right)_V}$$

$p = - \left( \frac{\partial F}{\partial T} \right)_T$ ;  $F$ -freie Energie;

$$p = - \frac{\partial}{\partial V} (E_0 + E_z) - \sum_q \frac{\partial(\hbar\omega_g)}{\partial V} \langle n_g(T) \rangle$$

$E_0$ -Energie des Grundzustands;  $E_z$ -Nullpunkt-Schwingungn  $\langle n_g(T) \rangle$ -Mittlere Zahl von Phononen für harmonischen Kristall:  $c_P = c_V$

$$\begin{aligned} \alpha &= \frac{1}{3B} \sum_q \left[ -\frac{V}{\omega_g} \frac{\partial \omega_g}{\partial V} \right] \underbrace{\frac{1}{V} \hbar \omega_g \frac{\partial}{\partial T} \langle n_g(T) \rangle}_{c_v(q)} \\ &= \frac{\partial(\ln \omega_g)}{\partial V} \equiv \gamma_q \end{aligned}$$

$\gamma_q$ -Grüneisenzahl Grüneisenparameter  $\gamma_q \equiv \frac{1}{c_V} \sum_q \gamma_q c_V(q) \approx \text{const.} \approx 1 \div 3$

$$\boxed{\alpha = \frac{\gamma c_V}{3B} \approx 10^{-5} K^{-1}}$$

$\alpha \approx T^3$  für  $T \ll \theta_D$ ;  $\alpha \approx \text{const}$  für  $T \gg \theta_D$

## 6.7 Wärmeleitfähigkeit

$$\kappa = \kappa^{ph} + \kappa^{el}$$

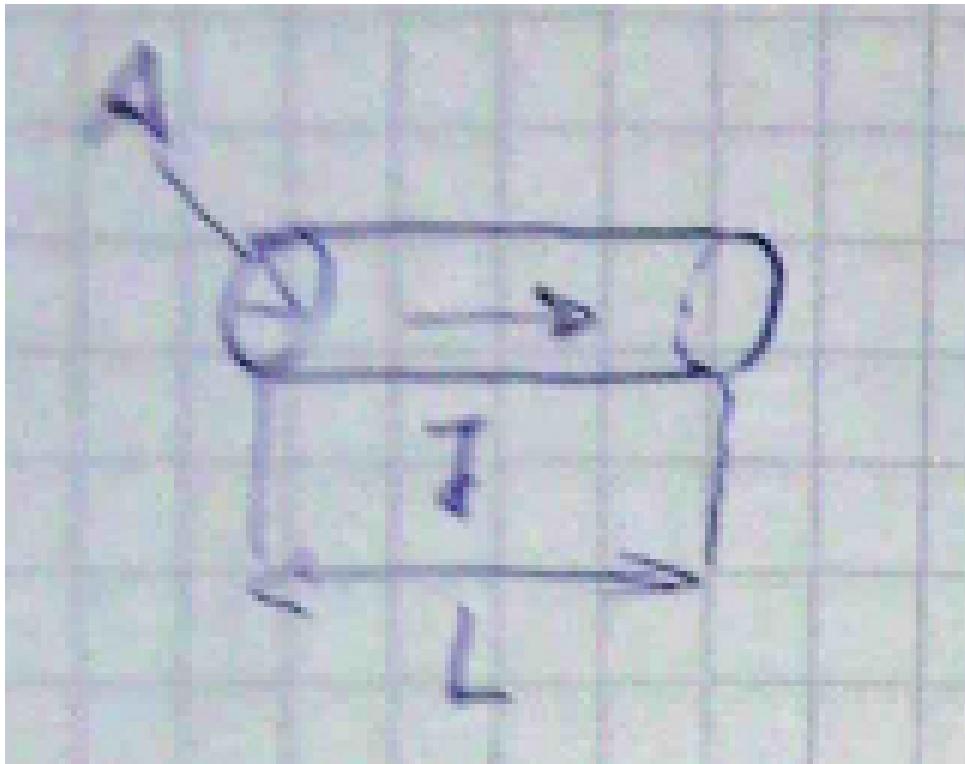
Wärmestromdichte  $\vec{J}_T = -\kappa \nabla T$ , nach den kinetischer Gastheorie  $\kappa = \frac{1}{3} v l c_v = \frac{1}{3} v^2 \tau c_v$ ;  $l$ -Länge;  $\tau$ -mittlere Zeit zur Phononenstöße

# Chapter 8

## Fermi-Gas freier Elektronen

### 8.1 Klassisches Drude Modell

1.  $e^-$  haben keine WW mit dem Gitterpotential
2.  $e^-e^-$  Wechselwirkung
3. äußere Felder wirken auf die  $e^-$
4.  $e^- \frac{1}{2}m\langle v^2 \rangle = \frac{3}{2}kT$
5.  $\tau$  Stoßanzahl, Rekombinationszeit  $\frac{1}{\tau} \frac{dt}{\tau}$  = Wahrscheinlichkeit für Stöße



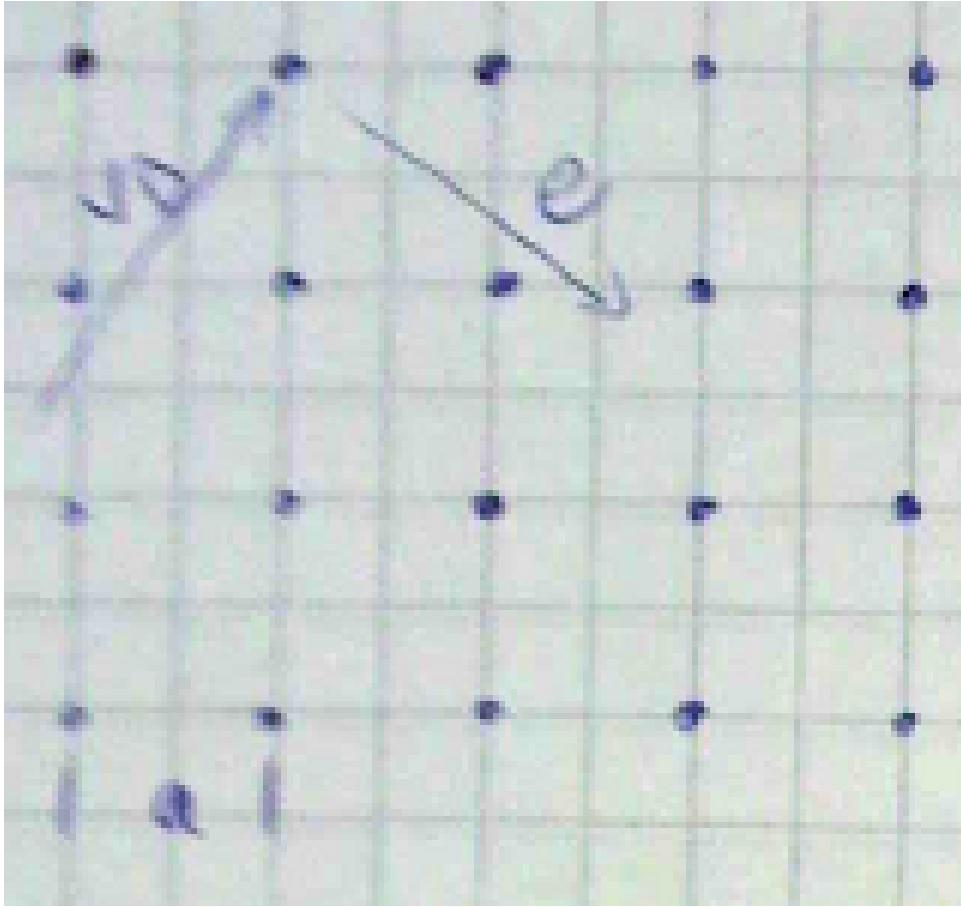
$$\vec{J} = \rho j; j = \sigma \vec{E}; j = \frac{I}{A}; E = \frac{V}{L}; \Rightarrow V = RJ; \frac{\rho L}{A}$$

$$j = -ne\vec{v}_D$$

$$\vec{v}|_{t=t_1} = v'_{t=t_0} - \frac{e\vec{E}t}{m}$$

$$\vec{v}_D = \langle \vec{v} \rangle = \langle v_0 \rangle - \frac{eE\tau}{m} \quad (8.1)$$

$$= \frac{eE\tau}{m} \quad (8.2)$$



$$\begin{aligned}
\vec{j} &= \frac{ne^2\tau}{m} \vec{E}; \sigma = \frac{ne^2\tau}{m}; \tau = \frac{m}{\rho ne^2} \\
a &\approx 10^{-10} m; \tau = \frac{a}{\sqrt{\langle v \rangle}} \approx \frac{a}{\sqrt{\frac{3k_B T}{m}}} \Rightarrow \tau = 10^{-14} s \\
a|_{300K} &= n10^{23}; \sigma = 10^5 \frac{1}{\Omega cm} \\
\sqrt{\frac{3k_B T}{m}} &\approx 10^5 \frac{m}{s}; l = \frac{\langle v^2 \rangle}{\tau} \approx 1 \text{ bis } 10 \cdot 10^{-10} m \\
l|_{4K} &\approx 100 \mu m
\end{aligned}$$

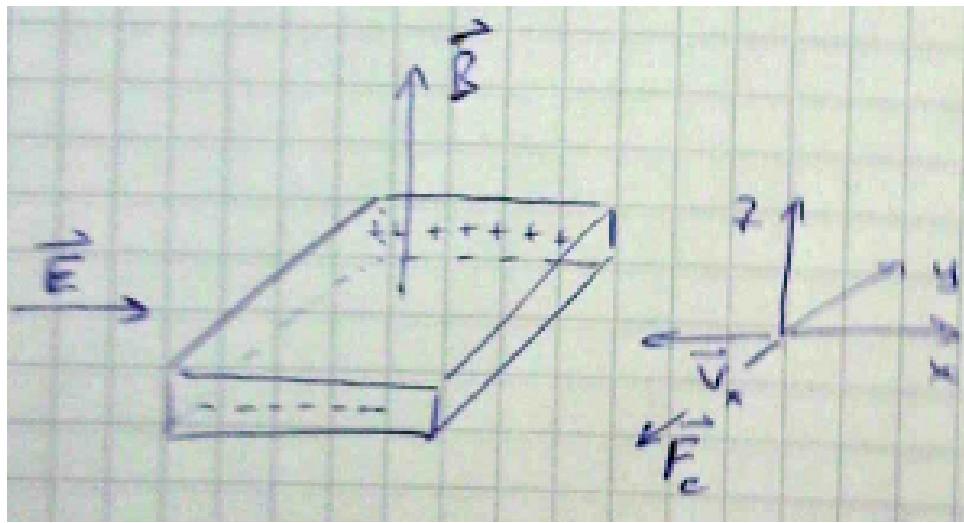
## 8.1 Impuls Relaxation

$\vec{v} = \frac{\vec{p}}{m} \Rightarrow \vec{j} = -\frac{ne\vec{p}}{m}$  Stoßwahrscheinlichkeit:  $\frac{dt}{\tau}$  keine Stoßwahrscheinlichkeit  $1 - \frac{dt}{\tau}$

$$p(t + dt) = (1 - \frac{dt}{\tau})[p(t) + F(t)dt + \mathcal{O}(dt^2)] \quad (8.3)$$

$$\approx p(t) - \frac{dt}{\tau}p(t) + F(t)dt + \mathcal{O}(dt^2) \quad (8.4)$$

$$\frac{dp(t)}{dt} = -\frac{p(t)}{\tau} + F(t)$$



Hall-Effekt

$$F = -eE - e\vec{v} \times \vec{B}$$

$$E_\gamma = v_x B_z = -\frac{1}{en} j_x B_z = R_H j_x B$$

$$R_H = -\frac{1}{en}$$

Kupfer  $Cq$  -  $R_H = -5,3 \cdot 10^{-11} \frac{m^3}{c}$  Aluminium  $Al$  -  $R_H = +9,9 \cdot 10^{-11} \frac{m^3}{c}$

$$\frac{dp}{dt} = -eE - \frac{e}{m} \vec{p} \times \vec{B} - \frac{\vec{p}}{\tau} = 0 \quad (8.5)$$

$$0 = -eE_x - \frac{e}{m} p_y B - \frac{p_x}{\tau} \quad (8.6)$$

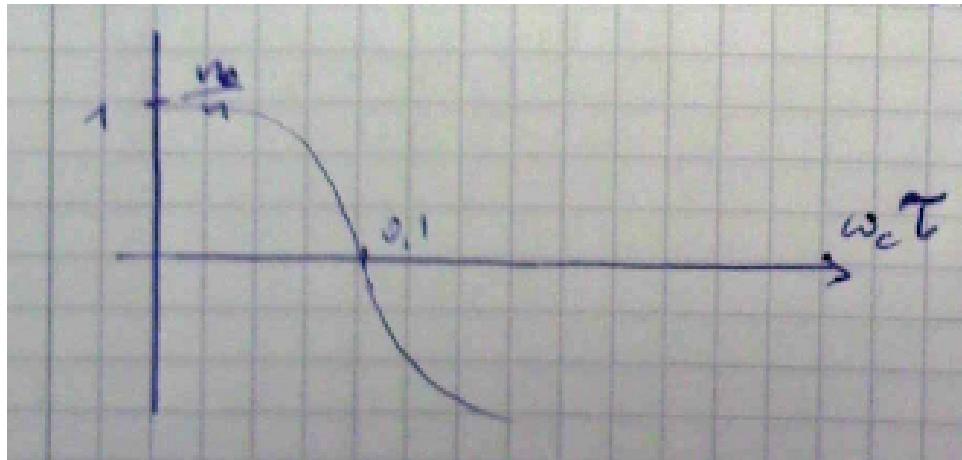
$$0 = -eE_y - \frac{e}{m} p_x B - \frac{p_y}{\tau} \quad (8.7)$$

$$\Rightarrow \sigma E_x = \omega_c \tau j_y + j_x$$

$$\Rightarrow \sigma E_y = -\omega_c \tau j_y + j_y$$

Zyklotronfrequenz

$$\omega_c = \frac{e}{m} B$$



Laut Drude sollte  $\omega_C \tau \propto B$  sein, ist es aber nicht (warum, nicht kapito)

## 8.1 Wechselstromleitfähigkeit

$$\frac{dp}{dt} = -\frac{\vec{p}}{\tau} - e\vec{E}; E(t) = \text{Re}\{E(\omega)e^{-i\omega t}\}$$

Versuch der Lösung

$$p(t) = -\text{Re}\{p(\omega)e^{-i\omega t}\}$$

$$-i\omega\vec{p}'(\omega) = -\frac{\vec{p}(\omega)}{\tau} - e\vec{E}; \vec{j} = -\frac{ne}{m}\vec{p} \Rightarrow j(t) = \text{Re}\{j(\omega)e^{-i\omega t}\}$$

$$j(\omega) = -\frac{ne}{m}p(\omega) = \frac{ne^2}{m} \frac{\vec{E}(\omega)}{\frac{1}{\tau} - i\omega} \equiv \sigma(\omega)\vec{E}(\omega)$$

$$\boxed{\sigma(\omega) = \frac{\sigma_0}{1 - i\omega\tau}}$$

$$\text{Magnetfeld } H(\omega) \approx 0; \frac{v}{c} \ll 1; v_D \approx 10^{-3} \frac{m}{s}$$

$$\text{Maxwell-Gleichungen } \lambda = \frac{2\pi c}{\omega} \gg e \text{ Ampersche Gesetz: } \vec{\nabla} \times \vec{H} = j + \epsilon_0 \frac{\partial E}{\partial t}$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{\nabla} \times \vec{E} = -\nabla^2 E = i\omega\mu_0\sigma\vec{E} - i\omega\epsilon_0\vec{E} \quad (8.8)$$

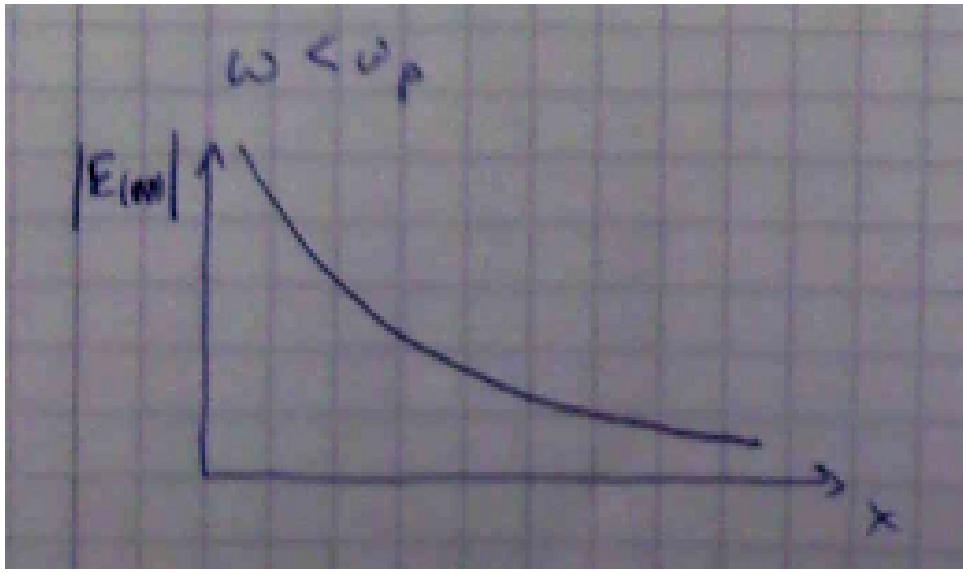
$$= w^2\epsilon_0\mu_0\epsilon(\omega)\vec{E} \quad (8.9)$$

$$\epsilon(\omega) = 1 + \frac{i\sigma(\omega)}{\epsilon_0\omega}$$

$$1. \text{ hohe Frequenzen } \sigma(\omega) = \omega_0 \frac{1+i\omega\tau}{1+\omega^2\tau^2} \approx \sigma_0 \frac{i}{\omega\tau}; \Rightarrow \epsilon(\omega) = 1 - \frac{\sigma_0}{\epsilon_0\tau\omega^2} = \frac{\omega_0^2}{\omega^2}$$

Die Plasmafrequenz, ist gerade die Frequenz wo die  $e^-$  dem Feld noch folgen können.

$$\omega_p = \frac{ne^2\tau}{m\epsilon_0\tau} = \frac{ne^2}{m\epsilon_0}$$



$$2. \text{ kleine Frequenzen } \omega\tau \ll 1$$

$$\sigma(\omega) = \sigma_0 \frac{1 + i\omega\tau}{1 + \omega^2\tau^2} = \sigma_0(1 + i\omega\tau)$$

$$\epsilon(\omega) = 1 + \sigma(\text{mega}) \frac{1}{\epsilon_0\omega} = 1 + \sigma_0 \left( \underbrace{\frac{i}{\epsilon_0\omega}}_{\epsilon_2} - \underbrace{\frac{\tau}{\epsilon_0}}_{\epsilon_1} \right)$$

$$\epsilon(\omega) == i\epsilon_2$$

$$k = \frac{\omega}{c} \sqrt{\epsilon(\omega)} = \frac{\omega}{c} \sqrt{\frac{\sigma_0}{\epsilon_0 \omega}} \frac{1+i}{\sqrt{2}} = \frac{1}{s}(1+i)$$

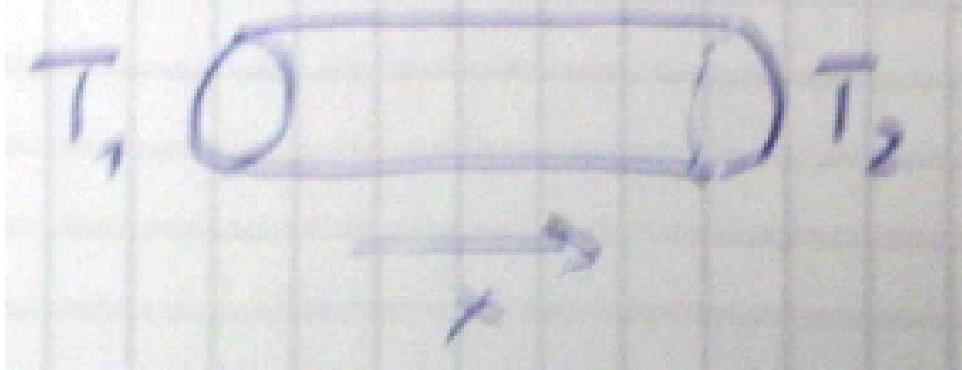
$$s = c \sqrt{\frac{2\epsilon_0}{\sigma_0 \omega}}$$

$s$  ist der Skin oder Leitschichtdicke (Dimension Länge) oder der Skin-Effekt. Der Strom fließt nun noch an der Oberfläche des Leiters.

1853 Widermann-Franz. Die Wärmeleitfähigkeit und die Leitfähigkeit ist zur Temperatur proportional:

$$\frac{\kappa}{\sigma} = LT$$

L-Loreenzahl zwischen  $2,2 - 2,8 \cdot 10^{-3} \frac{\omega \Omega}{K^2}$



$$j^T = \kappa \nabla T$$

$$j_x^T = \left\langle \frac{1}{2} v_x [u_x(x - v\tau)i - u_c(x + v\tau)] \right\rangle \quad (8.10)$$

$$= n \langle v_x^2 \rangle \tau \frac{du_e}{dT} \left( -\frac{dT}{dx} \right) \quad (8.11)$$

$$c_v = n \frac{du}{dT}; \langle v^2 \rangle = \langle v_x^2 \rangle = \langle v_z^2 \rangle = \langle v_y^2 \rangle$$

$$j^T = \underbrace{\frac{1}{3} v^2 \tau c_v}_{\kappa = \frac{1}{3} v^2 \tau c_v = \frac{1}{3} l v c_v}$$

$$LT = \frac{\kappa}{\sigma} = \frac{c_v}{ne^2} \frac{mv^2}{3}$$

$$\Rightarrow c_v = \frac{3}{2} n k_B$$

$$L = \frac{\kappa}{\sigma} \frac{3}{2} n k_B \frac{k_B^2}{K^2} T = 1,1 \cdot 10^{-3} \frac{\omega \Omega}{K^2} \frac{mv^2}{2} = \frac{3}{2} k_B T$$

tatsächlich:  $c_v^2$  Faktor 100 kleiner,  $v^2$  ist ein Faktor 100 größer

## 8.2 Sommerfeld-Theorie der Metalle

Klassische Ideales Gas Maxwell-Bolzmann Verteilung

$$f_{MG} = f(v) = n \left( \frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} e^{-\frac{mv^2}{k_B T}}$$

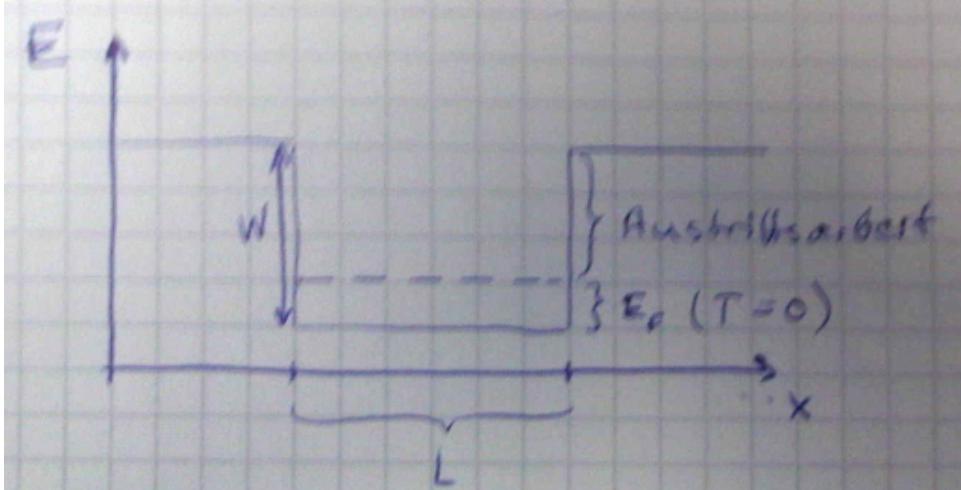
Pauliprinzip:

Fermi Dirac Verteilung

$$f_{FD} = f(v) = \left( \frac{m}{2\pi\hbar} \right)^3 \frac{2}{e^{\frac{mv^2/2 - \mu}{k_B T}} + 1}$$

$$n = \int_V f(v) dV; k_B T_0 = \nu$$

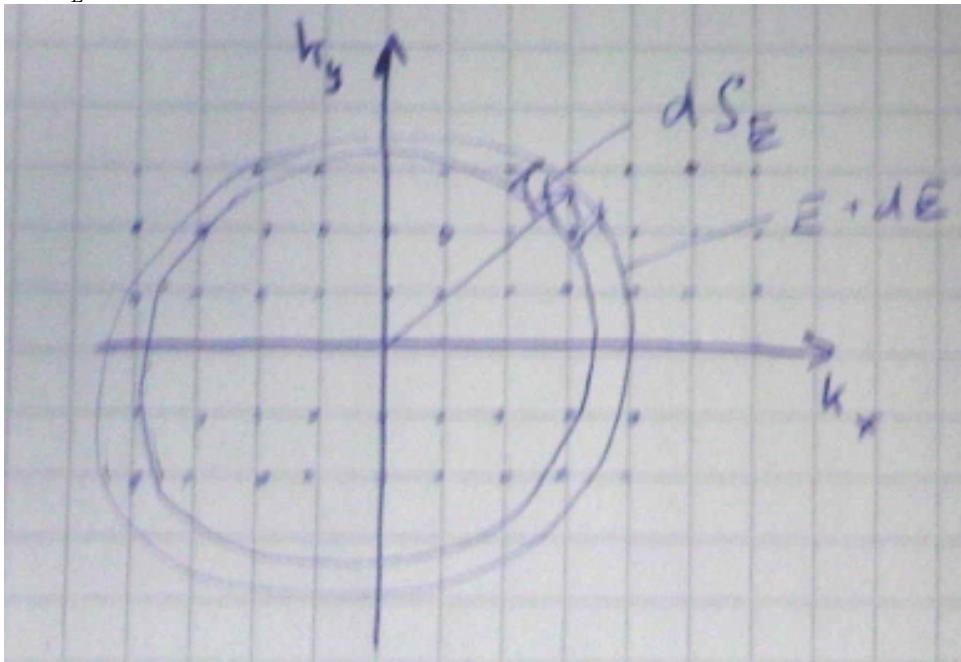
Zustandsdichte des freien Elektronen Gases:



N Elektronen SchrGl:  $-\frac{\hbar}{2m} \nabla \psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$ ;  $\psi(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{-\vec{k}\vec{r}}$ ;  $1 = \int_V |\psi(\vec{r})|^2 dV$ ;  $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ ;

Peridizitätsbedingung:  $\psi(x, y, z) = \psi(x + L, y, z)$

$$k_i = \frac{2\pi}{L} m_i \quad i = x, y, z; m = 1, 2, 3$$



$$\mathcal{D}(E)dE = \frac{V}{(2\pi)^3} \int_E^{E+dE} d^3k = \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{1}{\hbar} \int_{E=const.} \frac{dS_E}{v_g}$$

$$\rho_x = \frac{V}{(2\pi)^3}$$

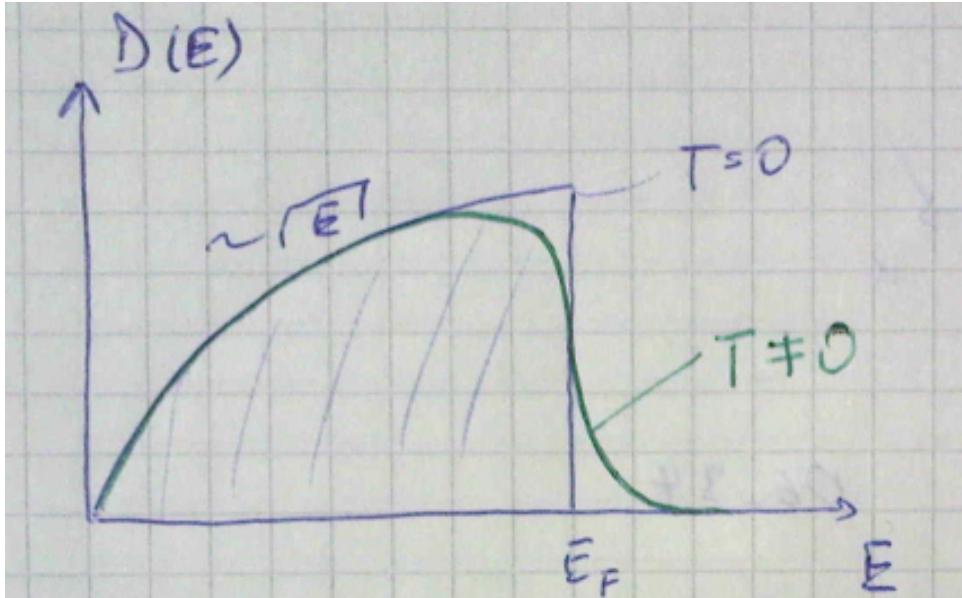
$$\text{Gruppengeschwindigkeit: } v_g = \frac{\partial E}{\partial(\hbar k)} = \frac{\hbar k}{m}$$

$$\text{Randbemerkung: } \frac{1}{v_g} \int dS_E = \frac{1}{v_g} - 4\pi k^2$$

$$\mathcal{D}_\uparrow(E) = \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{1}{\hbar} \frac{m}{\hbar k} 4\pi k^2 = \frac{(2m)^{3/2}}{4\pi^2 \hbar^2} V \sqrt{E}$$

Volumen normierte und mit 2  $e^-$  besetzte Zustandsdichte:

$$\mathcal{D}(E) = \frac{1}{V} (\mathcal{D}_\uparrow + \mathcal{D}_\downarrow) = \frac{(2m)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^2} \sqrt{E}$$

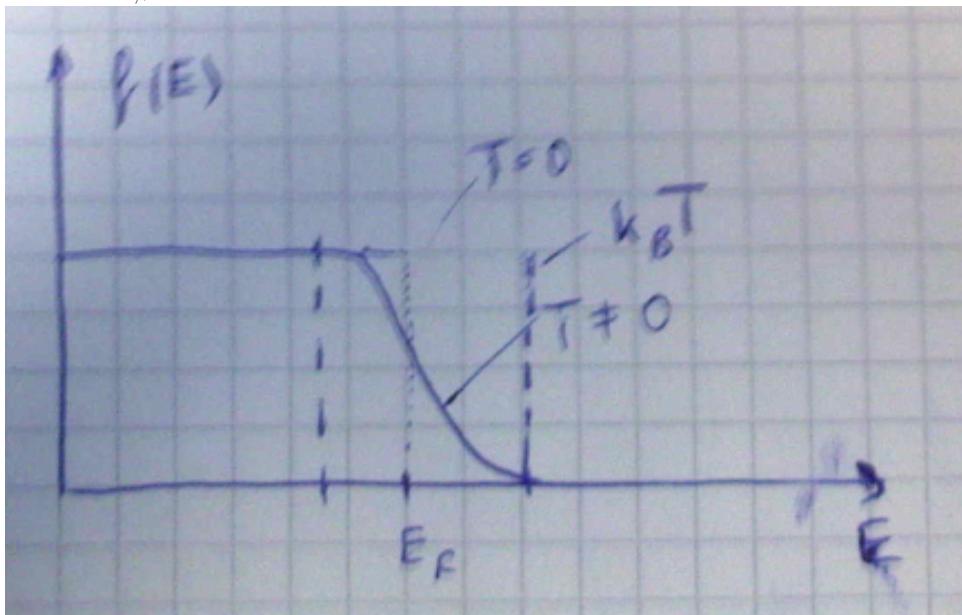


$$\rho_k^\infty = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^\alpha$$

$$D^{2D} = \frac{m}{\pi \hbar^2}; D^{1D}(E) = \frac{1}{\pi \hbar} \sqrt{\frac{2}{E}}$$

$$f(E, T=0) = \begin{cases} 1 & E < \mu \\ \frac{1}{2} & E = \mu \\ 0 & E > \mu \end{cases}$$

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



$$n = \frac{N}{V} = \int_0^\infty \mathcal{D}(E) f(E, 0) dE = \int_0^{E_F}$$

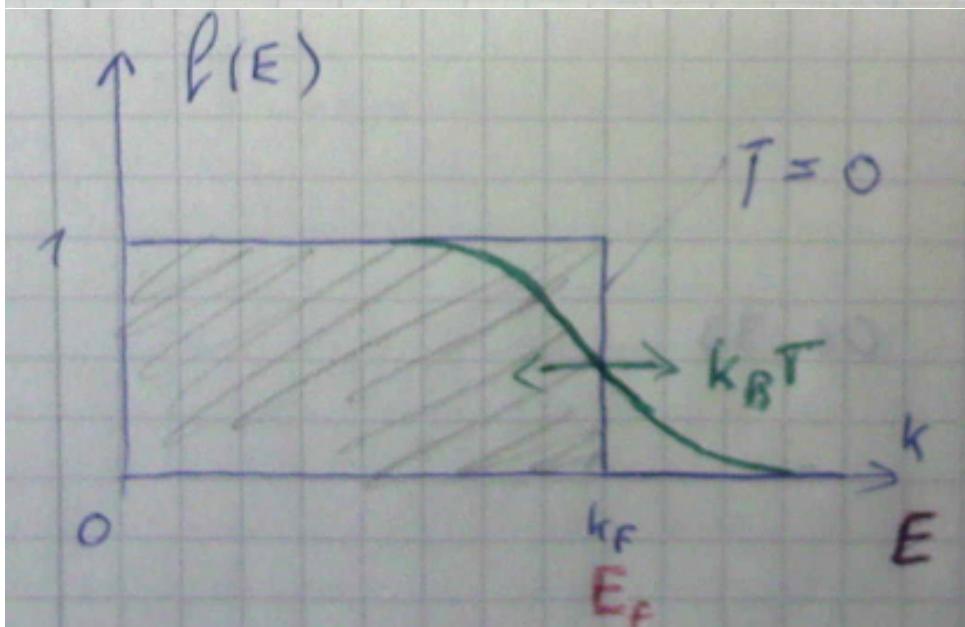
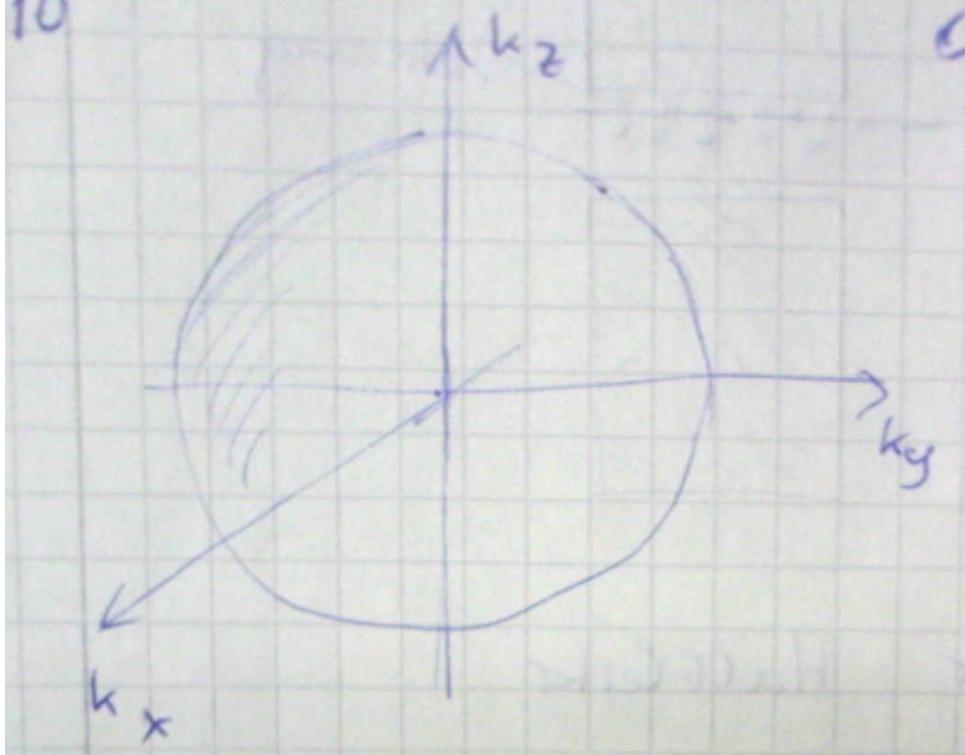
$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n)^{2/3}$$

Fermi-Energie:  $E_F = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n)^{2/3}$  mit Elektronendichte  $n = \frac{N}{V}$  Fermi-Wellenvektor  $k_F = (3\pi^2 n)^{1/3}$  Fermi Impuls:  $p_F = \hbar k_F$  Fermi-Geschwindigkeit  $v_F = \frac{\hbar}{m} (3\pi^2 n)^{1/3}$  Fermi Temperatur  $T_F = \frac{E_F}{k_B}$

	$n/10^6 m^{-3}$	$k_f/A^{-1}$	$v_F 10^6 \frac{m}{s}$	$E_F/eV$	$FT/K_F$
Al	18,1	1,8	2,0	11,7	135000
Cu	8,5	1,4	1,6	7,0	82000
Ag	5,9	1,2	1,4	5,5	64000

$$\mu(T) \approx E_F [1 - \frac{\pi^2}{12} \left( \frac{T}{T_F} \right)^2]$$

TODO Einleitende Abbildungen möglich am anfang von Sommerfeldtheorie einfügen



Kurze Einleitung was die Quantennatur der Theorie ist (Pauliprinzip, Besetzung in der Fermikugel, nur an der Fermikante befindliche elektronen sind relevant für verschiedene Effekte)

## 8.2 Spezifische Wärme

$c_V = \frac{\partial}{\partial T} U(T)$  mit  $U$  als innere Energie

$$c_V = \frac{\partial}{\partial T} U(T) \quad (8.12)$$

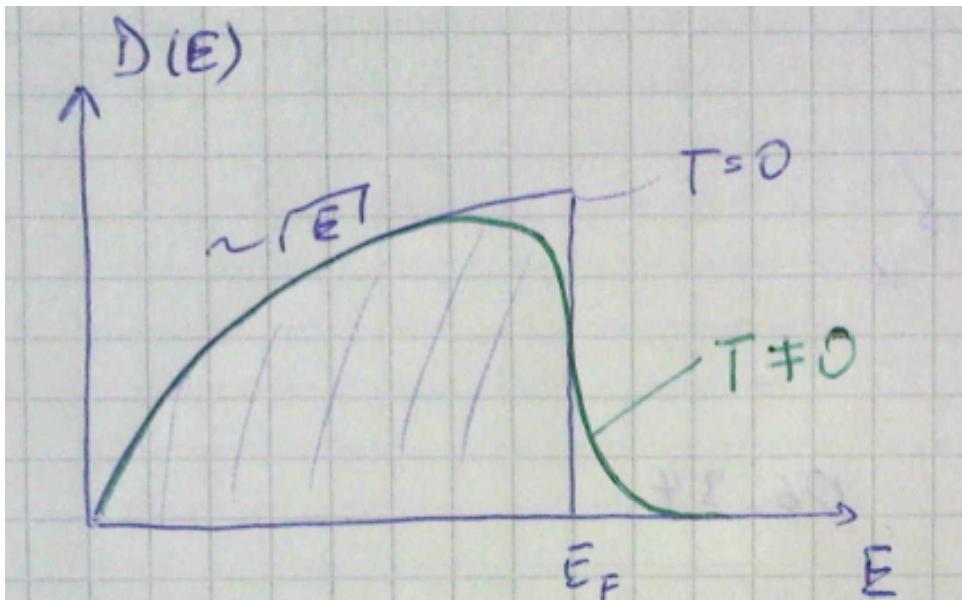
$$= \frac{\partial}{\partial T} \int_0^\infty E D(E) f(E, T) dE \quad (8.13)$$

$$= \frac{\partial}{\partial T} \frac{1}{2\pi^2} \left( \frac{2m}{\hbar} \right)^{3/2} \int_0^\infty \frac{E^{3/2} dE}{e^{\frac{E-\mu}{k_B T}} - 1} \quad (8.14)$$

$$D(E) = \frac{(2m)^{3/2} \sqrt{E}}{2\pi^2 \hbar^3} \quad (8.15)$$

$$= \frac{3}{2} n \sqrt{E} \left[ \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n)^{2/3} \right]^{-3/2} \quad (8.16)$$

$$= \frac{3}{2} \frac{n}{E_F} \left( \frac{E}{E_F} \right)^{1/2} \quad (8.17)$$



'grobe'-Rechnung:

$$U(0) = \int_0^{E_F} E D(E) dE \quad (8.18)$$

$$= \frac{3}{2} \frac{n}{E_F^{3/2}} \frac{2}{5} E_F^{5/2} \quad (8.19)$$

$$= \frac{3n}{5} E_F \quad (8.20)$$

$$= \frac{3n}{5} k_B T \quad (8.21)$$

Temperaturabhängige Anteil der innerer Energie:

$$\delta U(T) = U(T) - U(0) \approx n k_B T \frac{T}{T_F} = n k_B \frac{T^2}{T_F}$$

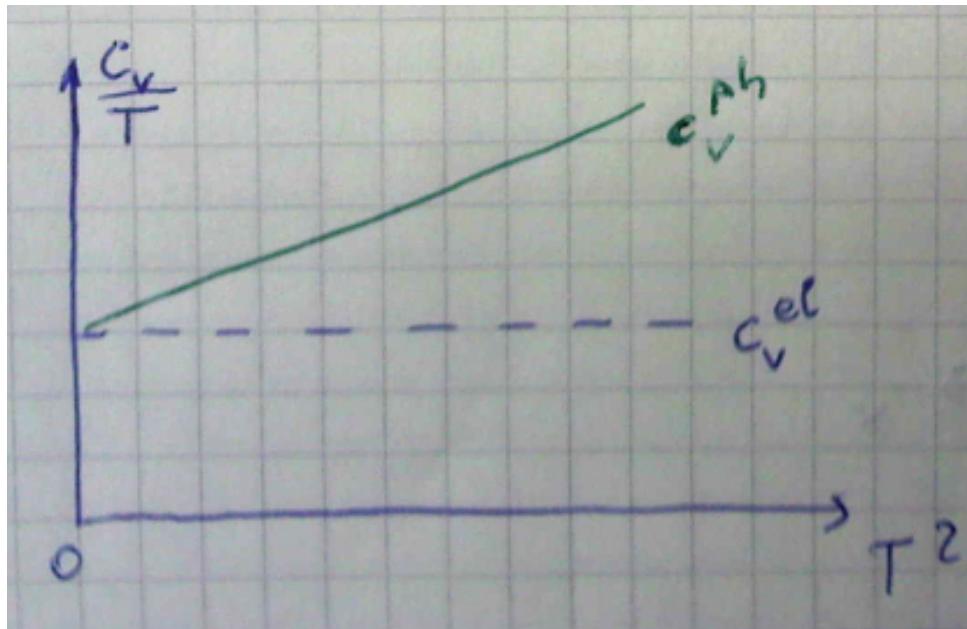
$\frac{T^2}{T_F}$  der Bruchteil der Elektronen der die thermische Energie  $k_B T$  pro Elektron aufnehmen kann

$c_V \approx \frac{\partial}{\partial T} [\delta U(T)] = \frac{2n k_B T}{T_F}$  ist um Faktor  $\frac{T}{T_F}$  kleiner als mit einem klass. Gas.

exaktere Näherungslösung:  $U(T) \approx U(0) + \frac{\pi^2}{6} D(E_F) (k_B T)^2$ ;  $c_V = \gamma T$ ; mit Sommerfeldkonstanten  $\gamma = \frac{\pi^2 3n k_B}{3T_F^2}$

Die gesamte spezifische Wärme:

$$c_V^{\text{ges}} = c_V^{\text{el}} + c_V^{\text{ph}} = \gamma T + \begin{cases} \beta T^3, & T \ll \theta_D \\ 3R = \text{const}, & T > \theta_D \end{cases}$$



Offene Fragen nach Sommerfeld-Modell:

1. Warum collidieren  $e^-$ -nen nicht mit Ionen?
2. Warum teilen/unterscheiden wir zwischen Metalle, Halbleiter, Isolatoren?
3. Warum wechselwirken  $e^-$ -nen nicht mit einander?

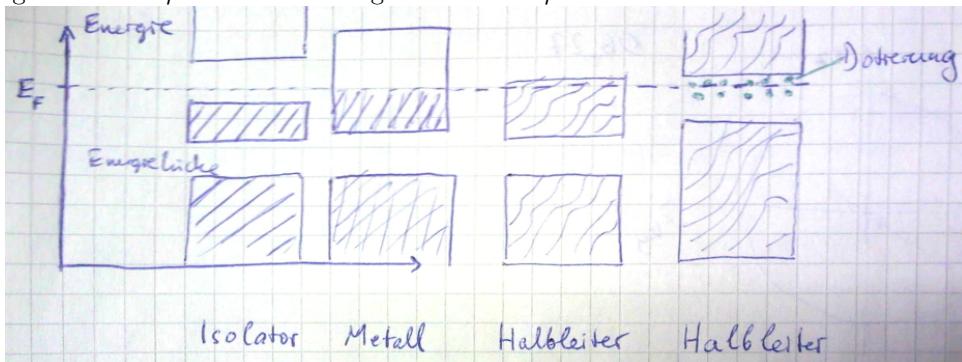
Die ersten zwei Fragen sind von Bloch-Theorie beantwortet. Die dritte Frage - Fermi-Flüssigkeiten (komplizierte QM-Theorie)

# Chapter 9

## Energiebänder

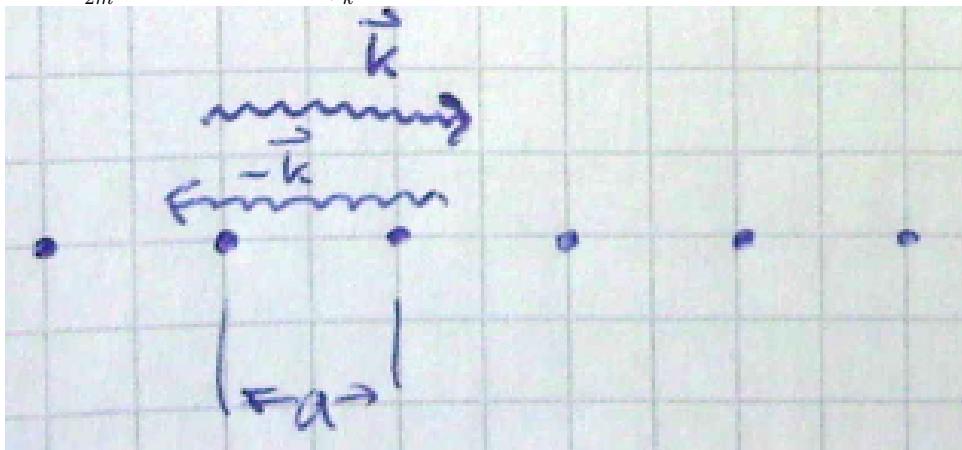
Oder warum unterscheiden wir zwischen Halbleiter, Leiter und Isolatoren.

'gute' Leiter:  $\rho \approx 10^{-10} \Omega \cdot \text{cm}$  'gute' Isolator:  $\rho \approx 10^{22} \Omega \cdot \text{cm}$



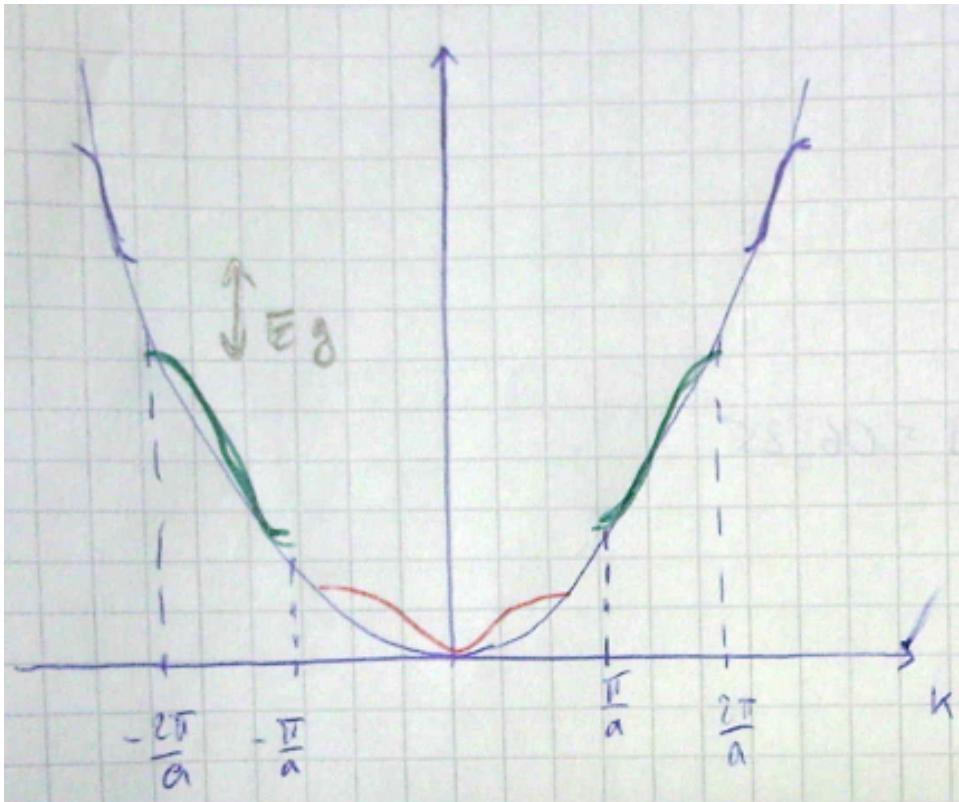
1 Beispiel: Modell des nahezu freien Elektronen

$$E_x = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}; \text{ Wellenfunktion } \psi_{\vec{k}} = e^{i\vec{k}\vec{r}}$$



Laue (Bragg-Reflektion)  $-\vec{k} + \vec{G} = \vec{k}$  mit reziproken Gitter  $\vec{G}$

$$(-\vec{k} + \vec{G})^2 = \vec{k}^2 \Rightarrow 2kG = G^2; \quad k = \frac{G}{2} = \pm \frac{\pi}{2} n_G$$

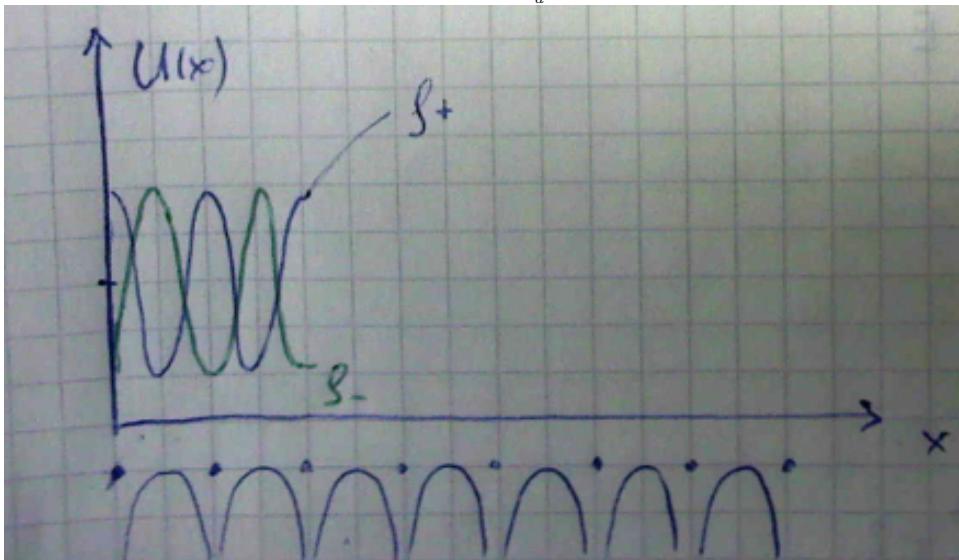


Zwei verschiedene Stehende Wellen:

$$\psi_+ \propto e^{i\frac{\pi x}{a}} + e^{-i\frac{\pi x}{a}} = 2\cos\frac{\pi x}{a}$$

$$\psi_- \propto e^{i\frac{\pi x}{a}} - e^{-i\frac{\pi x}{a}} = 2i\sin\frac{\pi x}{a}$$

Gruppengeschwindigkeit  $v_G = \frac{\partial E_k}{\partial p} = \frac{\hbar k}{m}|_{k=\pm\frac{\pi}{a}} = ! 0;$



$$\rho_+ = |\psi_+|^2 \propto \cos^2 \frac{\pi x}{a} = \frac{1}{2}(1 + \cos^2 \frac{2\pi x}{a})$$

$$\rho_- = |\psi_-|^2 \propto \sin^2 \frac{\pi x}{a} = \frac{1}{2}(1 - \cos^2 \frac{2\pi x}{a})$$

Wahrscheinlichkeitsdichte  $\psi^* \psi = |\psi|^2; \rho_0 = 1e = e^{-ikx} e^{ikx} e$

Erwartungswert der Potentiellen Energie:  $E_{\rho_+} < E_{\text{frei}} < E_{\rho_-}, U(x) = U \cos \frac{2\pi x}{4};$

$$E_g = \frac{1}{a} \int dx U(x) [|\psi_-|^2 - |\psi_+|^2] \quad (9.1)$$

$$= \frac{2U}{a} \int_0^a dx \cos \frac{2\pi x}{4} \frac{1}{2} [1 - \cos \frac{2\pi x}{a} - 1 - \cos \frac{2\pi x}{a}] \quad (9.2)$$

$$= \frac{2U}{a} \int_0^a dx \cos^2 \frac{2\pi x}{a} \quad (9.3)$$

$$= \frac{U}{a} \int_0^a dx (1 + \cos \frac{4\pi x}{a}) \quad (9.4)$$

$$= \frac{U}{a} \left( x + \frac{a}{4\pi} \sin \frac{4\pi x}{a} \right) \Big|_0^a \quad (9.5)$$

$$\equiv U = E_B - E_A \quad (9.6)$$

Elektronen in einem periodischen Potential (QM)

$$H\psi(\vec{r}) = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla + \tilde{V}(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$$

Translationsinvariant:  $\tilde{V}(\vec{r}) = \tilde{V}(\vec{r} + \vec{l})$

Entwicklung nach reziproken Gittervektoren  $\vec{G}$  (blochscher Ansatz)

$$\tilde{V}(\vec{r}) = \sum_G \tilde{V}_G \cdot e^{i\vec{G}\vec{r}}$$

$$\psi(\vec{r}) = \sum_k c_k e^{ik\vec{r}}$$

Einsetzen in die SGL:

$$\sum_{\vec{k}} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} c_k e^{i\vec{k}\vec{r}} + \sum_{k', \vec{G}} c_{k'} \tilde{V}_G e^{i(k' + \vec{G})\vec{r}} \equiv \sum_k c_k e^{i\vec{k}\vec{r}}$$

Umbenennung (summe über alle  $k'$ ):  $k' + \vec{G} = k \rightarrow$

$$0 = \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{r}} \underbrace{\left[ \left( \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E \right) c_k + \sum_G \tilde{V}_G c_{\vec{k}-\vec{G}} \right]}_{=0}$$

$$\left( \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E \right) c_k + \sum_G \tilde{V}_G c_{\vec{k}-\vec{G}} = 0$$

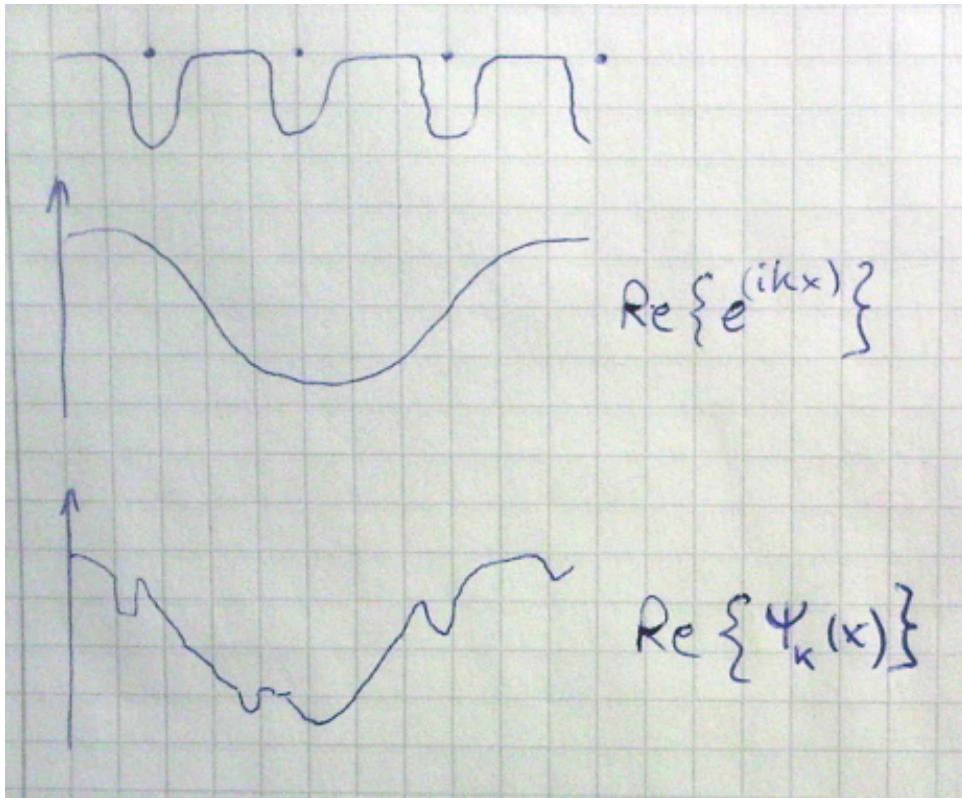
Dieser Satz algebraischer Gleichungen ist die Darstellung der Schrödigner Gleichung im  $\vec{k}$ -Raum  $\Rightarrow E_k$ -Energie Eigenwert.

$$\psi_k(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} c_{\vec{k}-\vec{G}} e^{i(\vec{k}-\vec{G})\vec{r}} \quad (9.7)$$

$$= \underbrace{e^{i\vec{k}\vec{r}}}_{\text{ebene Welle}} \underbrace{\sum_{\vec{G}} c_{\vec{k}-\vec{G}} e^{-i\vec{G}\vec{r}}}_{U_k(\vec{r})} \quad (9.8)$$

$$= U_k(\vec{r}) e^{i\vec{k}\vec{r}} \quad (9.9)$$

Bloch Theorem: Die Eigenfunktionen der SG. für ein periodisches Potential sind das Produkt aus einer ebenen Welle und einer Funktion  $U_k(\vec{r})$  mit der Periodizität des Gitters.



$$\psi_k(\vec{r} + \vec{R}) = \underbrace{U_k(\vec{r} + \vec{R}) e^{i\vec{k}\vec{r}}}_{\psi_{\vec{r}}} e^{i\vec{k}\vec{R}} \quad (9.10)$$

$$\psi_{k+G}(\vec{r}) \sum_G c_{k+g'-G} e^{i(\vec{k}+G'-G)\vec{r}}$$

Umbenennung  $G'' = G - G'$

$$\Rightarrow e^{i\vec{k}\vec{r}} \sum_{G''} \underbrace{c_{\vec{k}-\vec{G}''} e^{-i\vec{G}''\vec{r}}}_{U_{\vec{k}}(\vec{r})}$$

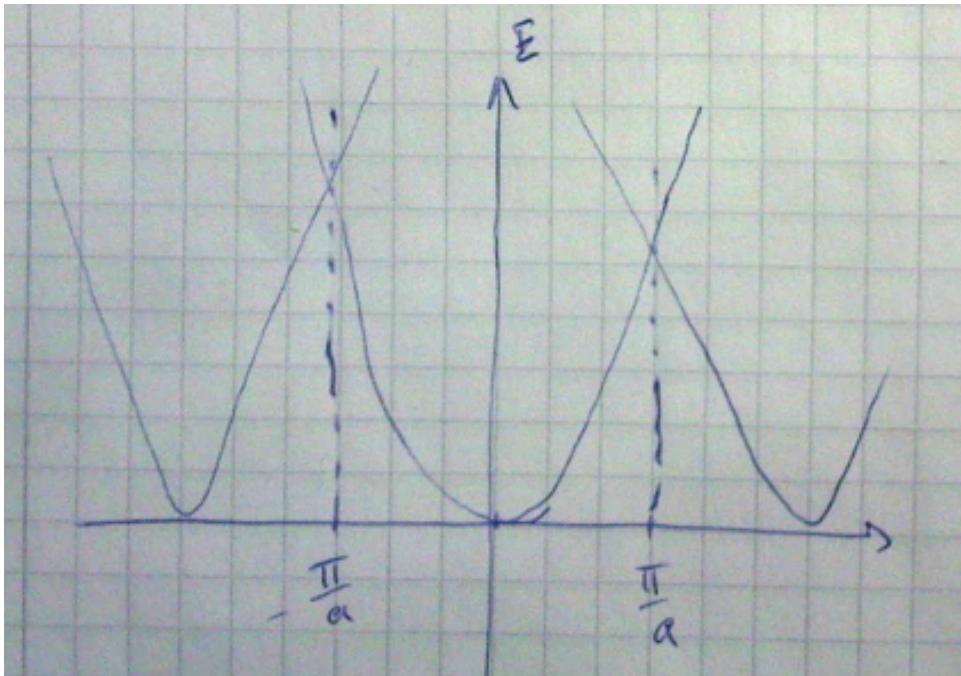
$$\Rightarrow \psi_{\vec{k}+\vec{a}}(\vec{r}) = \psi_k(\vec{r})$$

$$H\psi_{k+G}(\vec{r}) = E_{\vec{k}+\vec{G}'} \psi_{\vec{k}+\vec{G}'}(\vec{r})$$

$$H\psi_k(\vec{r}) = E_{\vec{k}+\vec{G}'} \psi_{\vec{k}}(\vec{r})$$

$$\Rightarrow E_{k+G'} = E_k$$

Lösung der SG. an der Grenze der Brillouin Zone.



$$(E - \frac{\hbar^2}{2m}|k - G|^2)c_{k-G} = \sum_G \tilde{V}_{G'} c_{k-G-G'}$$

$$c_{k-G} = \frac{\sum_G \tilde{V}_{G'} c_{k-G-G'}}{E - \frac{\hbar^2}{2m}|k - G|^2} \quad (9.11)$$

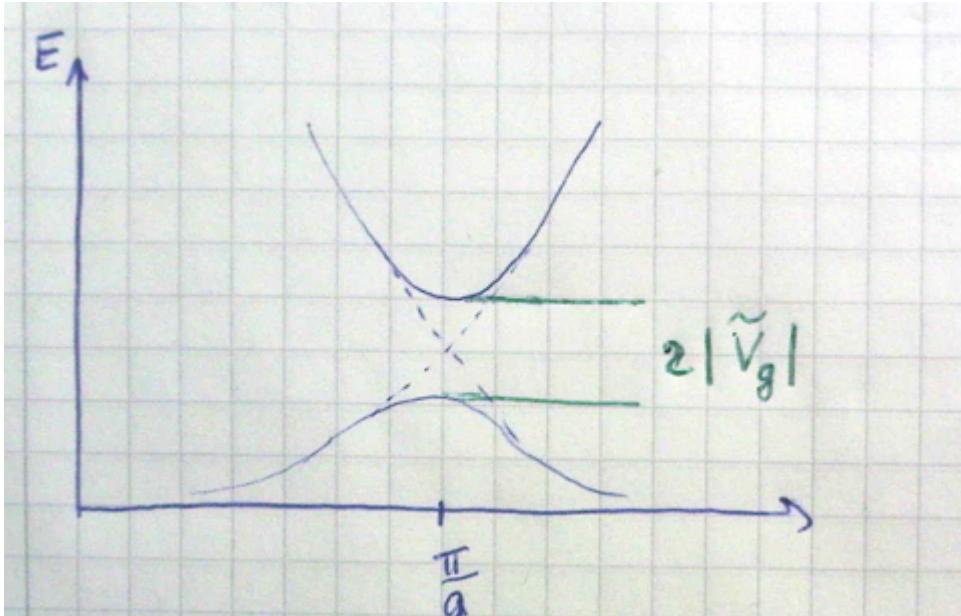
$$= \frac{\sum_{G''} V_{G''-G} c_{k-G''}}{\frac{\hbar^2}{2m}(k^2 - |k - G|^2)} \quad (9.12)$$

Umbenennung:  $G = G'' - G$  Nullstellen:  $k^2 = |\vec{k} - \vec{G}|^2$  Abkürzungen  $g = \frac{2\pi}{a}$ ;  $G = 0, G = g; \lambda_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$   
Zwei Komponenten Näherung

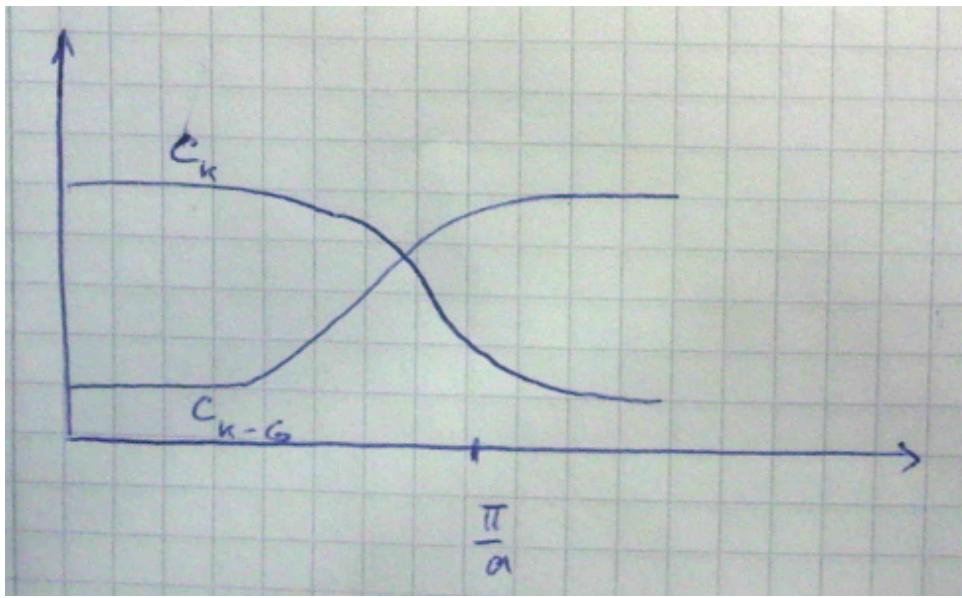
Erste Bedingung:  $\rightarrow (\lambda_k - E)c_k + \tilde{V}_g c_{k-g} = 0$  zweite Bedingung:  $\rightarrow (\lambda_{k-g} - E)c_{k-g} + \tilde{V}_g c_k = 0$

Daraus resultieren Energieniveaus:  $E_{\pm} = \frac{1}{2}(\lambda_{k-g} + \lambda_k) \pm \sqrt{(\lambda_{k-g} - \lambda_k)^2 + \tilde{V}_g^2}$  und  $k = \frac{g}{2} \rightarrow \lambda_{k-g} = \lambda_k$   
An der Grenze der Brillouin Zone

$$E_{\pm} = E_{\frac{g}{2}} \pm |\tilde{V}_g|$$

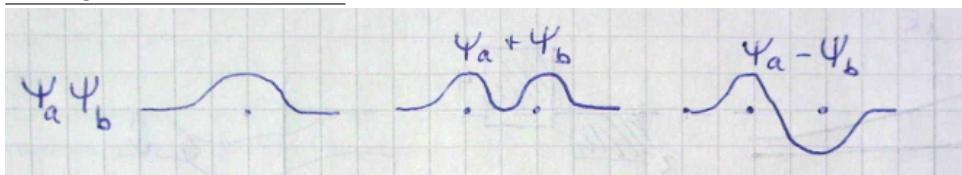


$$\frac{c_{k-G}}{c_k} = \frac{E-\lambda}{\tilde{V}_g}$$

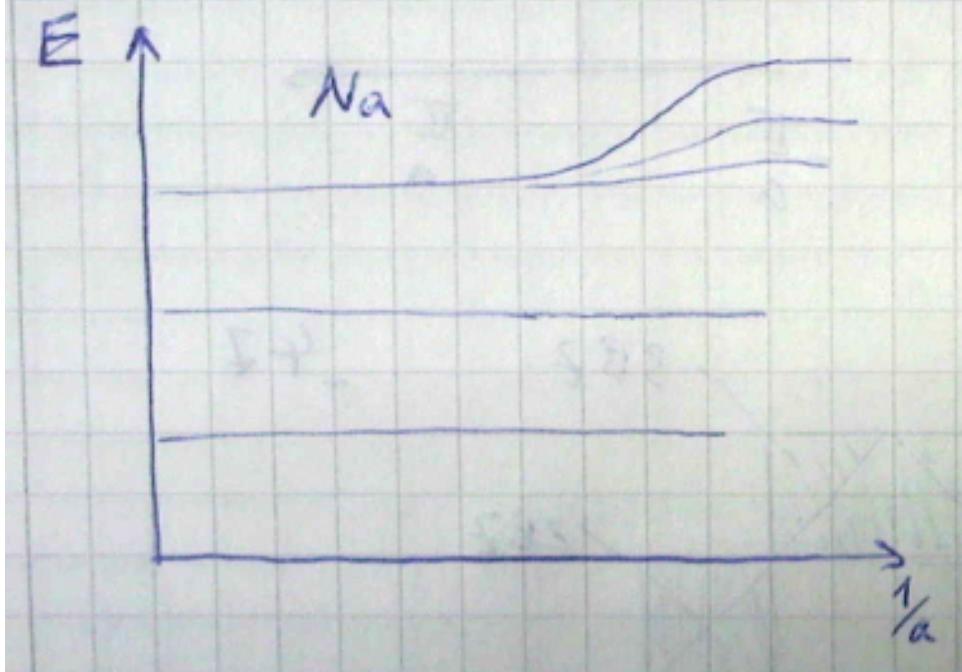


## 9.1 Tight-binding Model

'stark gebundene Elektronen'



$$\rho \propto |\psi_a - \psi_b|^2$$



Combination of Atomic Orbitals

LCAO = Linear Combination of Atomic Orbitals

$$H\phi = E\phi$$

$$H = H_A + H_S \quad (m \neq n)$$

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla + \tilde{V}(\vec{r} - \vec{R}_m) \quad R_m \equiv \text{Gittervektor}$$

$$H_S = \sum_{n \neq m} \tilde{V}_A(\vec{r} - \vec{R}_n)$$

Energie eigenwerte  $E_k$

$$E_k = \frac{\int \psi^* H \psi dV}{\int \psi^* \psi dV}$$

$$\psi_{\vec{k}} = \sum_m a_m \phi(\vec{r} \cdot \vec{R}_m) \quad a_m = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{i \vec{k} \cdot \vec{R}_m} \quad N \equiv \text{Anzahl der Atome}$$

Bloch-Funktionen  $\rightarrow$  orthonormal Basis lokalisierter Zustände Wnnier-Funkitonen

$$w_m(\vec{r} \cdot \vec{R}_m) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} e^{-i \vec{k} \cdot \vec{R}_m} \psi_{\vec{k}}(\vec{r} - \vec{R}_m)$$

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{R}_m} e^{i \vec{k} \cdot \vec{R}_m} w_m(\vec{r} - \vec{R}_m)$$

$$E_{\vec{k}} = \underbrace{\frac{1}{\int \phi^* \phi dV}}_{=1 \text{ Wellenfkt kaum Überlappung}} \frac{1}{N} \sum_{m,n} e^{i k(R_m - R_n)} \int \phi^*(r - R_n) [H_A + H_S(\vec{r} - \vec{R}_m) \phi(\vec{r} - \vec{R}_m)] dV$$

$$\alpha = - \int \phi^*(r - R_m) H_s(\vec{r} - \vec{R}_m) \phi(\vec{r} - \vec{R}_m) dV \equiv \text{Energieänderung durch das Nachbarpotential}$$

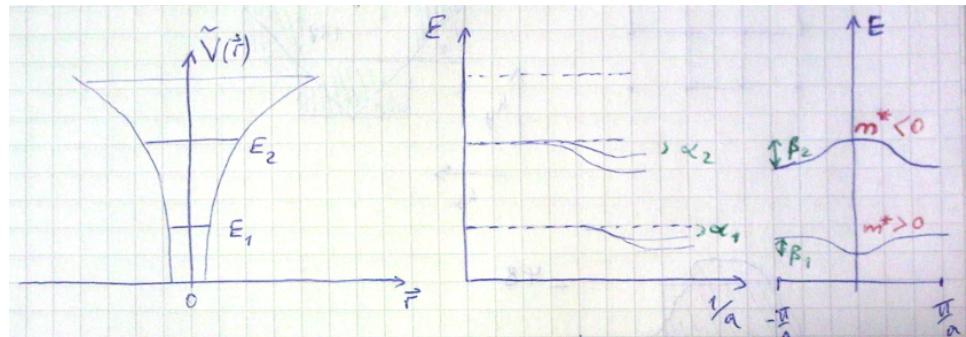
$$\beta = - \int \phi^*(r - R_n) H_S(\vec{r} - \vec{R}_m) \phi(\vec{r} - \vec{R}_n) dV \equiv \text{Energieänderung durch den Überlapp der W.F.}$$

$$E_{ki} = E_i - \alpha_i - \sum \beta_{i,n} e^{i k(R_n - R_m)} \quad (9.13)$$

$$= E_i - \alpha_i 2 \beta_i (\cos(k_x a) + \cos(k_y a)) \quad (9.14)$$

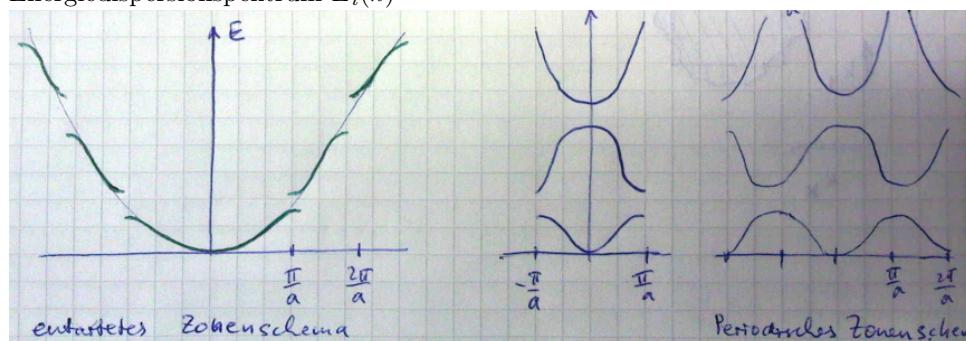
Für ein kubisch primitives Gitter  $R_m - R_n = (\pm a, 0, 0), (0 \pm a, 0), (0, a \pm a); \Rightarrow$  Entwickeln für kleine  $k$ :

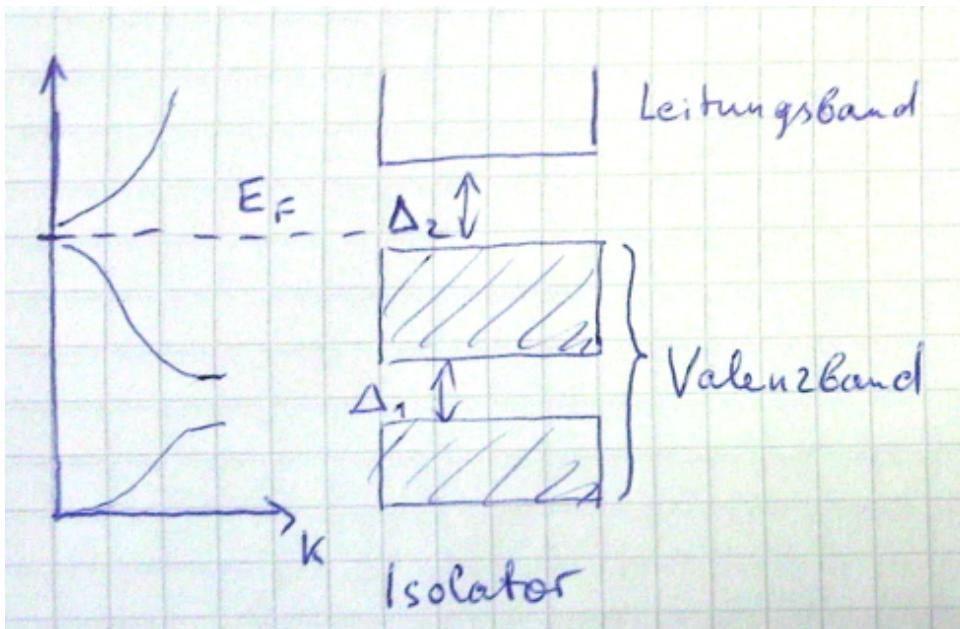
$$E_{k,i} = E_i - \alpha_i - 6\beta_i + \beta_i a^2 k^2$$



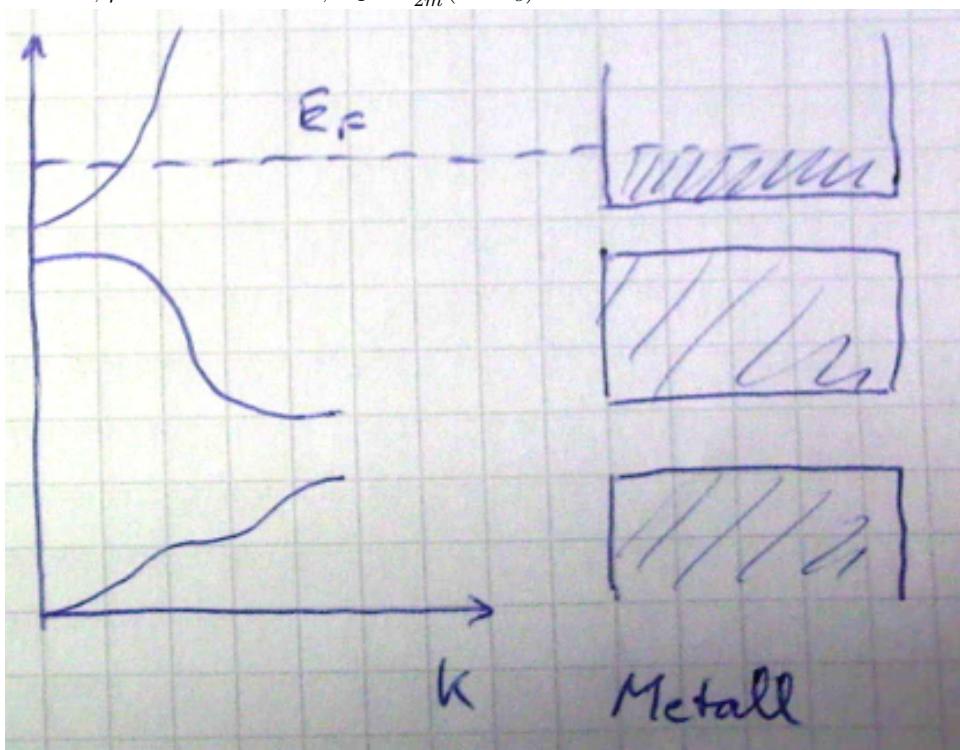
$$E_i = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \Rightarrow m_i^* = \frac{\hbar^2}{2\beta_i a^2}$$

Energiedispersionspektrum  $E_i(k)$

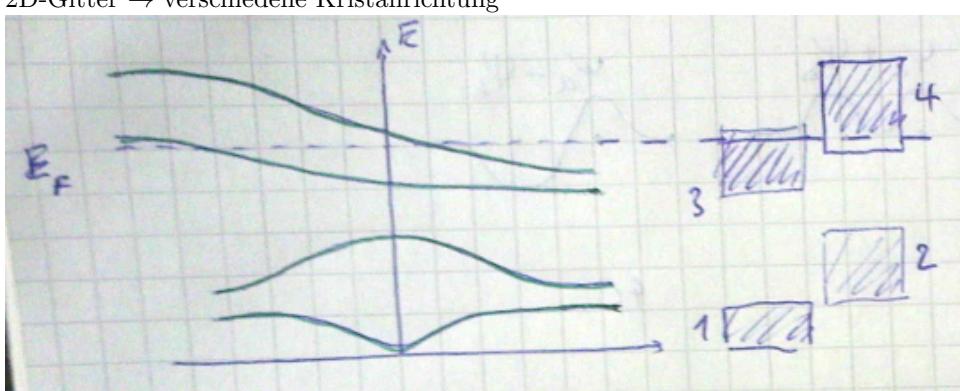




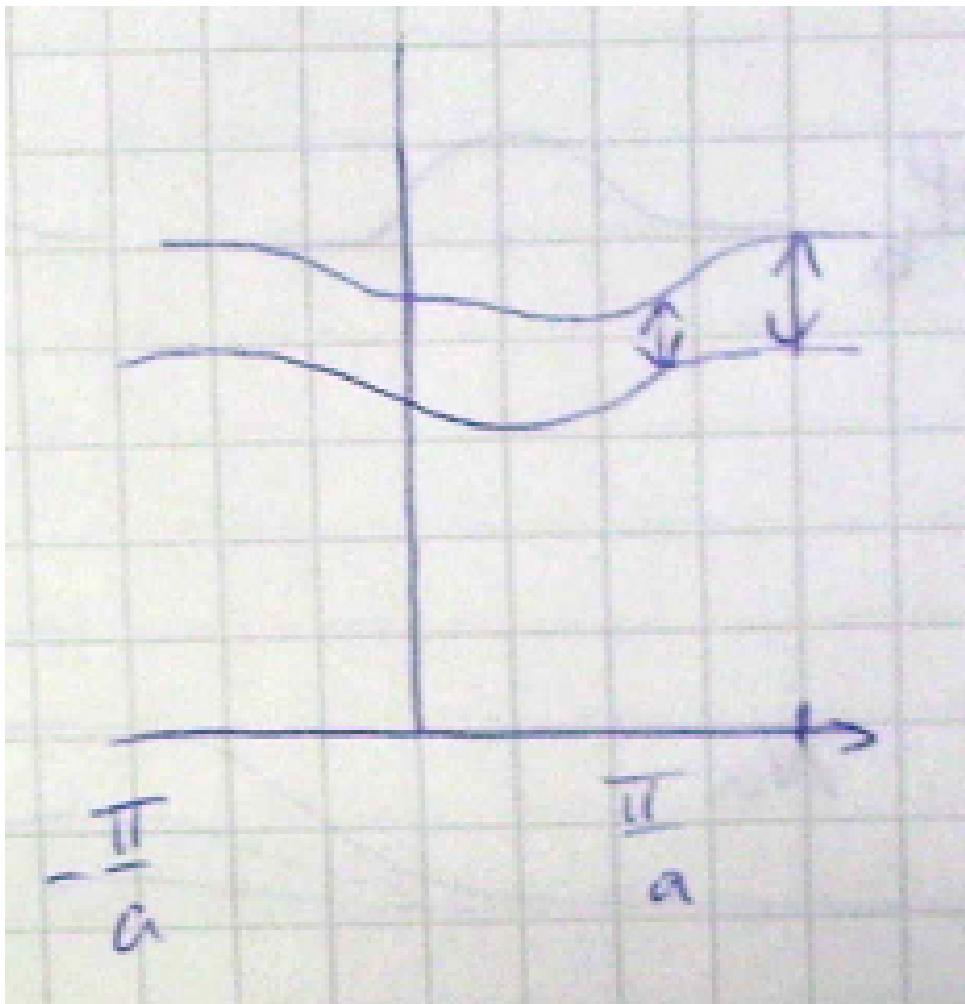
Isolator,  $\rho = 10^7 - 10^{14} \Omega m$ ;  $E_F = \frac{\hbar^2}{2m}(3\pi^2 n_e)^{2/3}$



Metall:  $\rho = 10^{-4} - 10^{-8} \Omega m$ ;  
2D-Gitter  $\rightarrow$  verschiedene Kristallrichtung

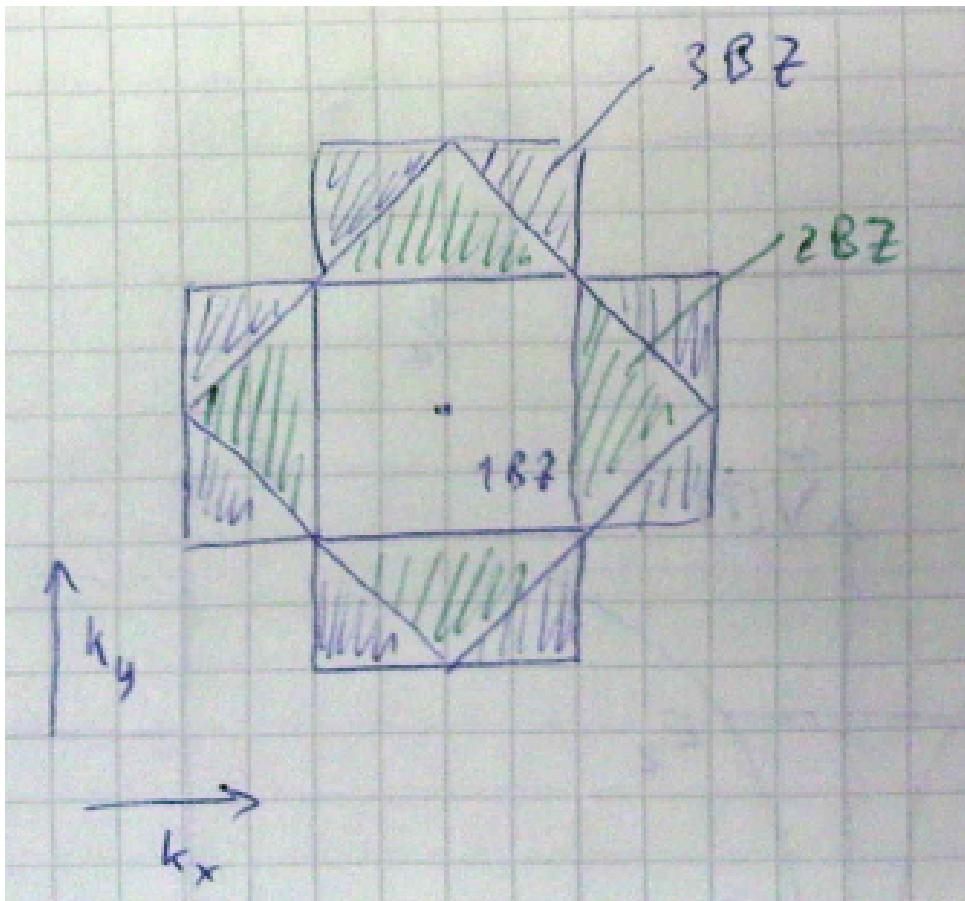


Halbmetalle As, Sb(Antimon), Bi



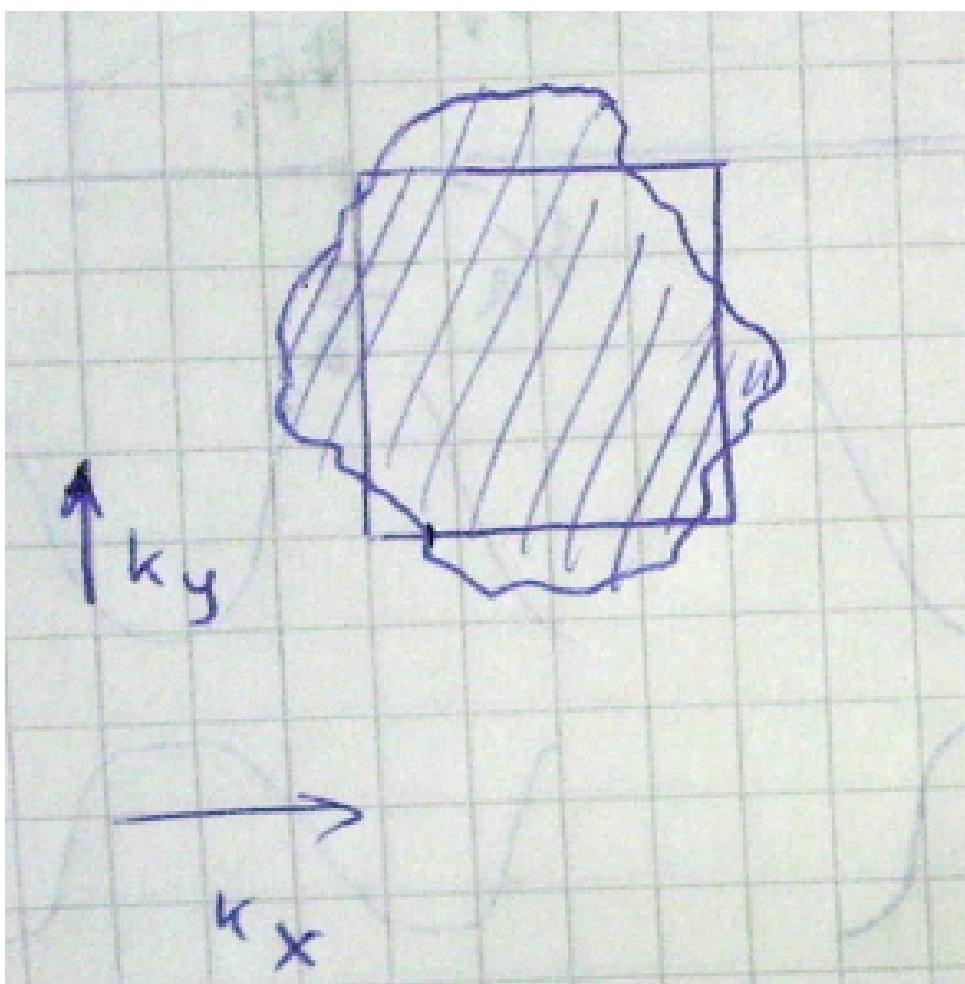
## 9.2 Brillouin-Zonen und Fermi- Flächen

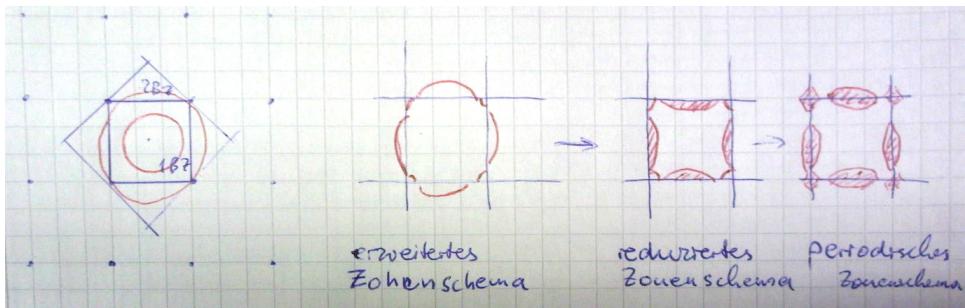
Brillouin-Zonen und Fermi Flächen (2D BZ)



an der zonengrenze (stehende Wellen)

$$\frac{\partial \omega}{\partial k} = \frac{1}{\hbar} \vec{\nabla} E_{\perp} = 0$$





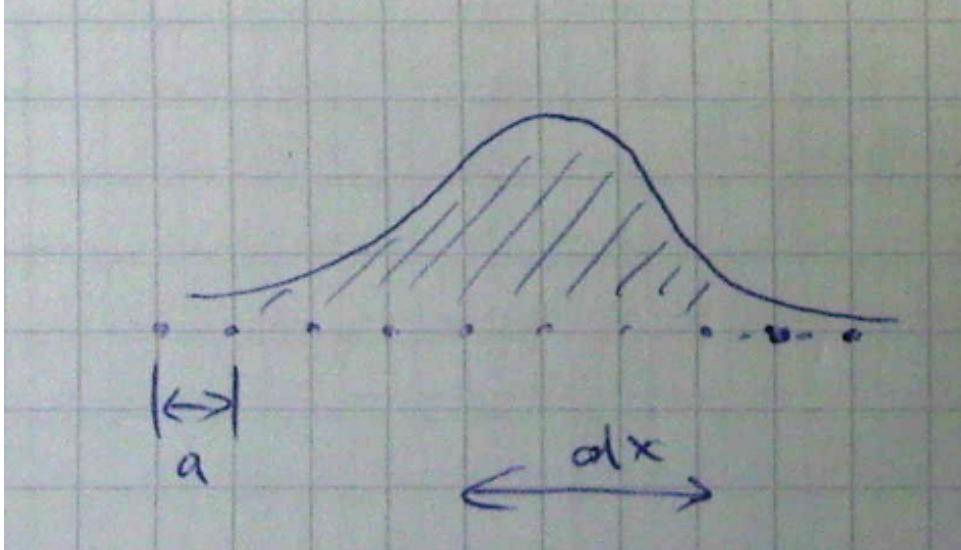
# Chapter 10

## Elektronische Transporteigenschaften

Bewegung der  $e^-$ -nen, effektive Masse.

### 10.1 Elektronien als Wellenpakete

Ausgedehnte Wellen  $\delta k \delta r > 1$



$$\psi(\vec{r}, t) = \sum_{\vec{k}} g(\vec{k}) \cdot e^{i(\vec{k}\vec{r} - \frac{\hbar k^2}{2m}t)}$$

mit  $r = \frac{pt}{2m}$

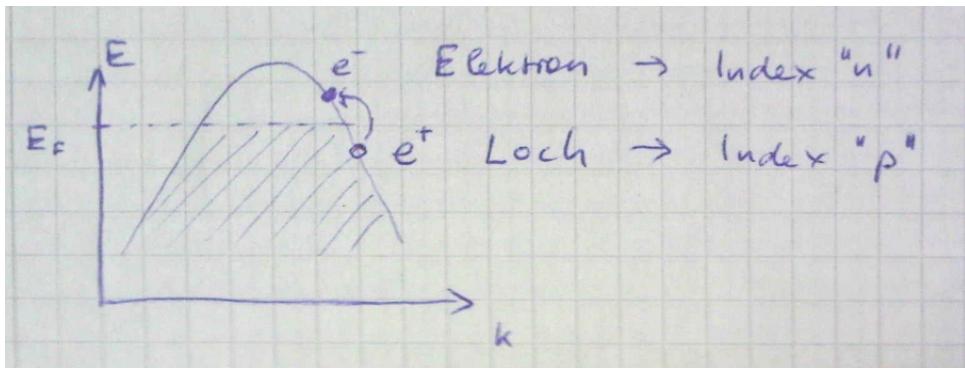
Koeffizienten  $g(\vec{k})$  sind innerhalb  $\delta k$  'gaußförmig' verteilt. Das entspricht einer semiklassischen Näherung.

$$\frac{\partial \vec{r}}{\partial t} \equiv \vec{v}(\vec{k}) = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} E(\vec{k}) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E(\vec{k})}{\partial \vec{k}}$$

mit  $E(\vec{k})$  Energie vom Wellenpaket. z.B. für freie  $e^-$ -nen  $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ ;  $v_g = \frac{\hbar k}{m}$  Gruppengeschwindigkeit.  
Semiklassische Bewegungsgleichung:

$$\hbar \frac{\partial \vec{k}}{\partial t} = \vec{F} = -e\vec{\mathcal{E}}(\vec{r}, t) - \vec{v}(\vec{k}) \times \vec{B}(\vec{r}, t)$$

$\vec{\mathcal{E}}$  Elektrisches Feld;  $\vec{B}$  magnetisches Feld;  $E(\vec{k}) = E(-\vec{k})$



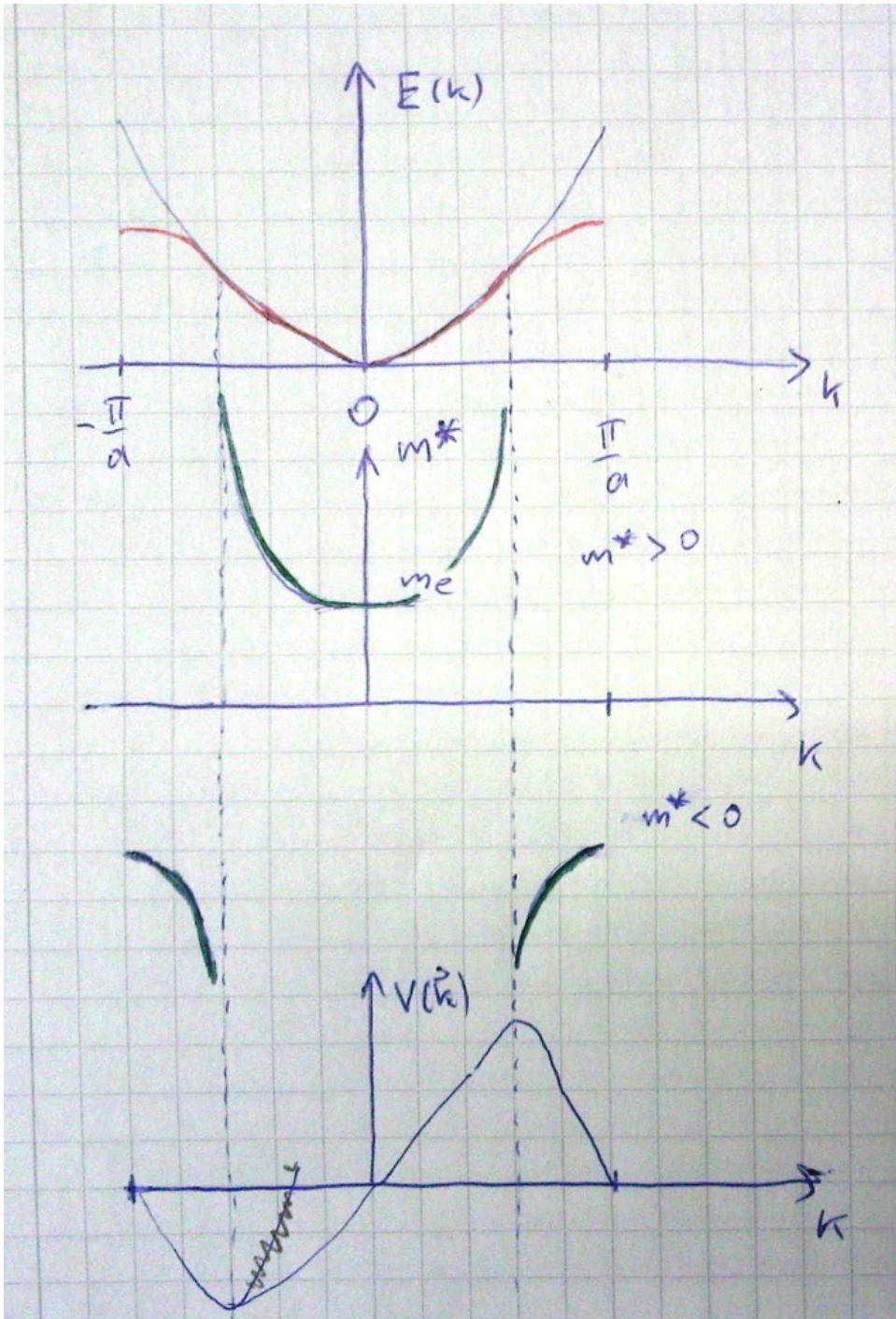
$$E_p(\vec{k}) = -E_n(\vec{k}); \sum \vec{k} = 0; \vec{k}_p = -\vec{k}_n$$

$$\text{Gruppengeschwindigkeit: } \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} \left( \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E(\vec{k})}{\partial \vec{k}} \right) = \frac{\partial}{\partial \vec{k}} \left( \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E(\vec{k})}{\partial \vec{k}} \right) \frac{d\vec{k}}{dt} = \frac{1}{\hbar^2} \vec{F} \frac{\partial^2 E(\vec{k})}{\partial \vec{k} \partial \vec{k}}$$

$$\frac{\partial v_i}{\partial t} = \frac{1}{\hbar} \sum_j \frac{\partial^2 E(\vec{k})}{\partial k_i \partial j} F_j$$

Tensor der effektive Masse  $[m*] \equiv \bar{\bar{m}}^*$   
mit

$$\left( \frac{1}{m^*} \right)_{ij} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E(\vec{k})}{\partial k_i \partial k_j}$$



1D:  $m^*$  ist klapare Größe  $m^*(k) = \frac{\hbar^2}{[\frac{d^2 E(k)}{dk^2}]}$

Bloch-oszillationen:  $\hbar \frac{dk}{dt} = F = -e\mathcal{E}$

Periode dieser Bloch Oszillationen:

$$T \propto \frac{\delta k}{|dk/dt|} \propto \frac{2\pi/a}{e\mathcal{E}/\hbar}$$

## 10.2 Ladungstransport: Elektronen und Löcher

$$\left[ \frac{1}{m^*} \right]_p = \frac{1}{\hbar^2} \left[ \frac{\partial^2 E(\vec{k})}{\partial \vec{k} \partial \vec{k}} \right]_p = \frac{1}{\hbar^2} \left[ \frac{-\partial^2 E(\vec{k})}{(-\partial \vec{k})(-\partial \vec{k})} \right]_p = - \left[ \frac{1}{m^*} \right]_n$$

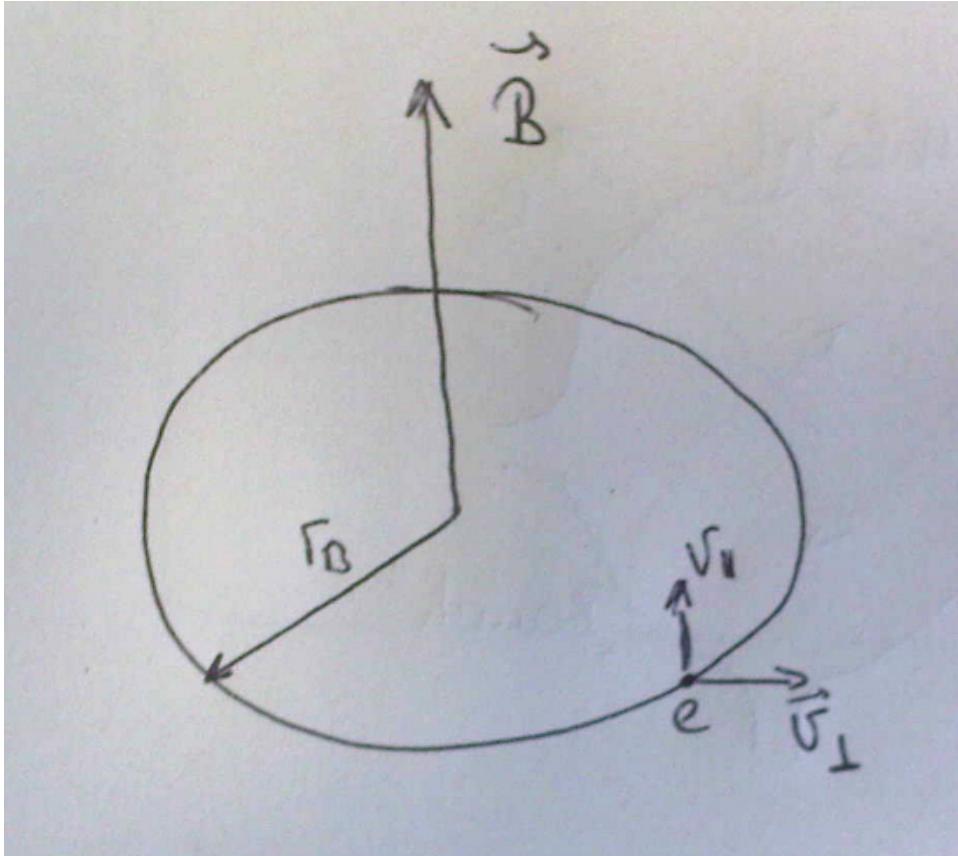
Bewegungsgleichungen:

$$\hbar \frac{\partial \vec{k}_n}{\partial t} = -e(\vec{\mathcal{E}} + \vec{v}_n \times \vec{B})$$

$$\hbar \frac{\partial \vec{k}_p}{\partial t} = +e(\vec{\mathcal{E}} + \vec{v}_p \times \vec{B})$$

### 10.3 Elektronen im Magnetfeld

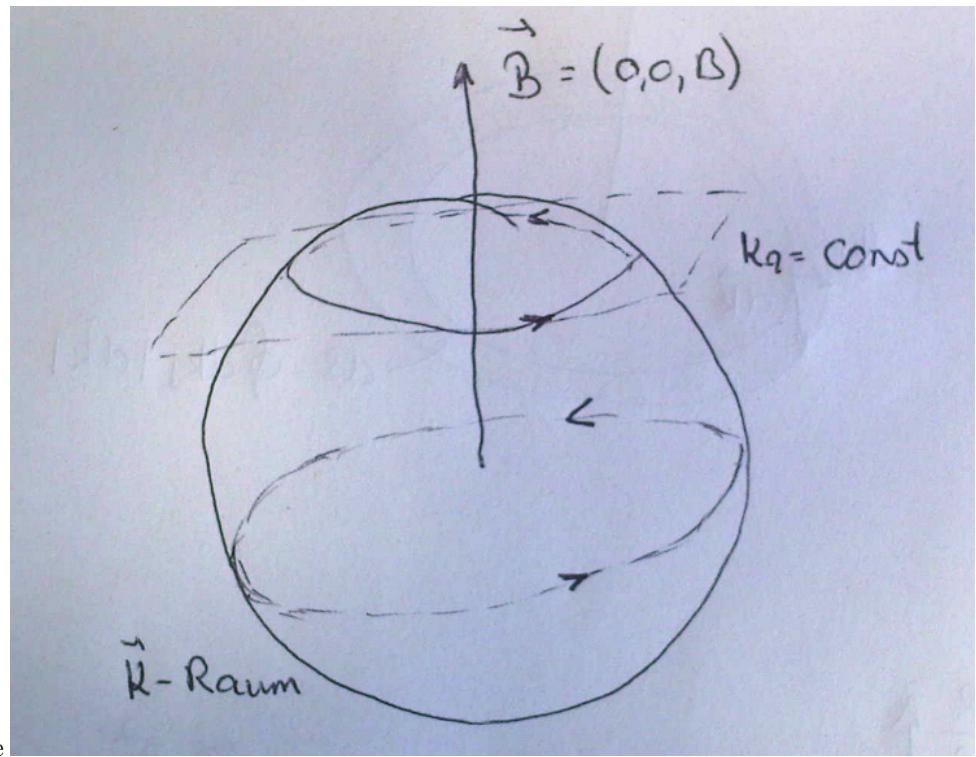
Semiklassische Näherung für Bloch Elektronen



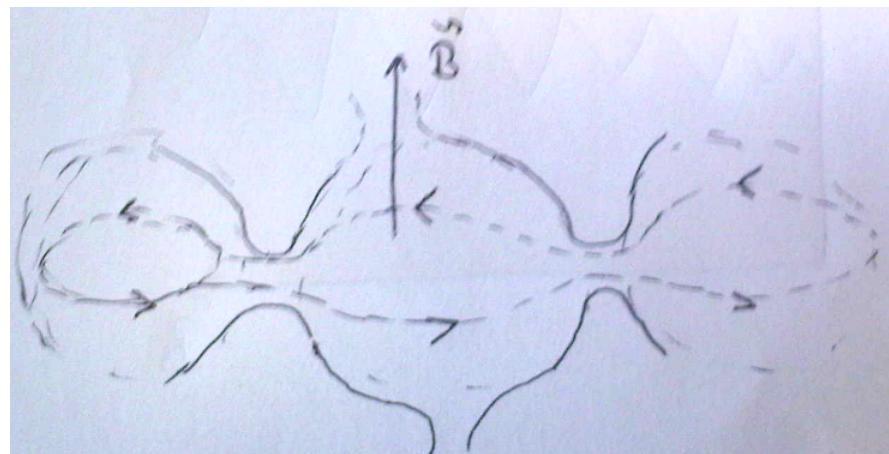
Im realen Raum:  $\tau_B = \frac{mv_{\perp}}{eB}$  Umlauffrequenz ist Zyklotronfrequenz:  $\omega_c = \frac{eB}{m}$  Im  $\vec{k}$ -Raum mit  $\vec{v} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial \vec{k}}$ , und  $\hbar \frac{\partial \vec{k}}{\partial t} = \vec{F}$  durch  $E = const$ ,  $\Rightarrow \frac{\partial E}{\partial t} = \frac{\partial E}{\partial \vec{k}} \cdot \frac{\partial \vec{k}}{\partial t} = \hbar \vec{v} \left( -\frac{e}{\hbar} \vec{v} \times \vec{B} \right) = 0$

durch  $k_n = const$ ,  $\Rightarrow \frac{\partial (\vec{k} \cdot \vec{B})}{\partial t} = \frac{\partial \vec{k}}{\partial t} \cdot \vec{B} + \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \cdot \vec{k} = 0$

Im  $\vec{k}$ -Raum Umlaufbahn eines Elektron ist eine Schnittlinie von einer Fläche konstanter Energie ( $\equiv$  Fermi-Fläche)  $T \ll T_F$  und eine Ebene  $\perp \vec{B}$  ( $\vec{k}_{||} = const.$ )



a) 'geschlossene' Fermi-Fläche



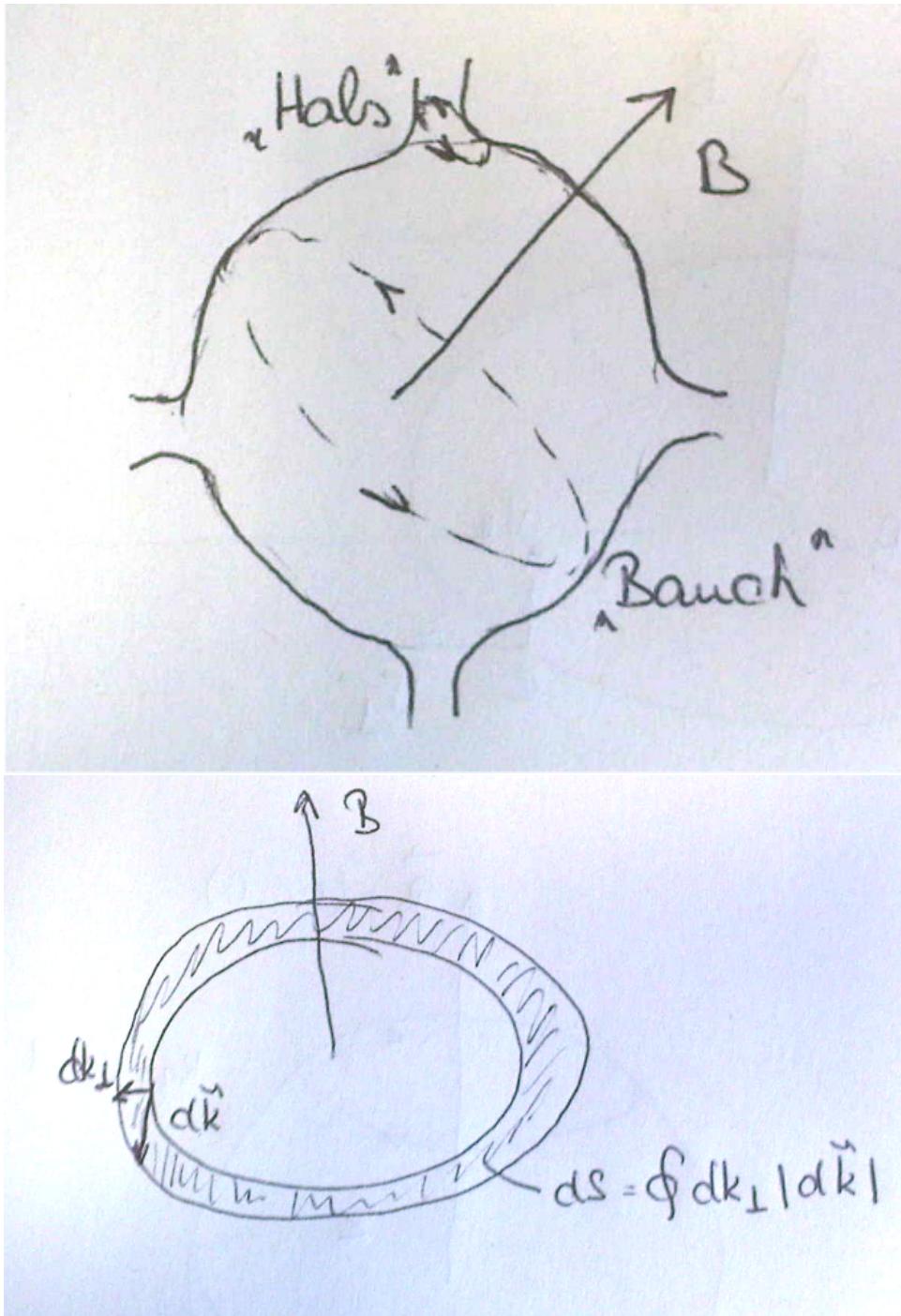
b) 'Offene' Fermi-Fläche (z.B. Cu,Au)

$$\text{Bewegungsrichtung: } \frac{\partial \vec{k}}{\partial t} = -\frac{e}{\hbar} \vec{v} \times \vec{B} = -\frac{e}{\hbar^2} \frac{\partial E}{\partial \vec{k}} \times \vec{B}$$

Die Zeit  $T_c$  die ein Elektron für einen Bahnumlauf benötigt:

$$d\vec{k} = -\frac{e}{\hbar^2} [\nabla_k E(\vec{k}) \times \vec{B}] dt \quad d\vec{k} \perp \nabla_k E$$

$$T_c = \oint dt = \oint \frac{|d\vec{k}|}{|dE/dk_{\perp}|} \frac{\hbar^2}{eB} = \frac{\hbar^2}{eB} \oint \frac{dk_{\perp}}{\partial E} \cdot |d\vec{k}| = \frac{\hbar^2}{eB} \frac{dS}{dE}$$



$$dS = \oint dk_{\perp} |dk|$$

für freien  $e^-$ -nen:  $\omega_c = \frac{eB}{m}$ ;  $T_c = \frac{2\pi m}{eB}$ ;  $\frac{dS}{\partial E} = \frac{2\pi m}{\hbar^2}$ : Bloch Elektronen  $m \equiv m_c$

## 10.4 Experimentelle Methoden zur Bestimmung der Fermi-Flächen

- 1) de-Haas-van-Alphen-Oszillationen (Magnetisierung)
- 2) Schubnikov-de-Haas-Oszillationen (Widerstand)
- 3) Zyklotronresonanz: Gantmacher-Effekt

Landau-Niveaus: Quantisierung der Elektronbahnen im Magnetfeld (1930)

$$\frac{1}{2m}(-i\hbar\nabla + e\vec{A})^2\psi = E\psi$$

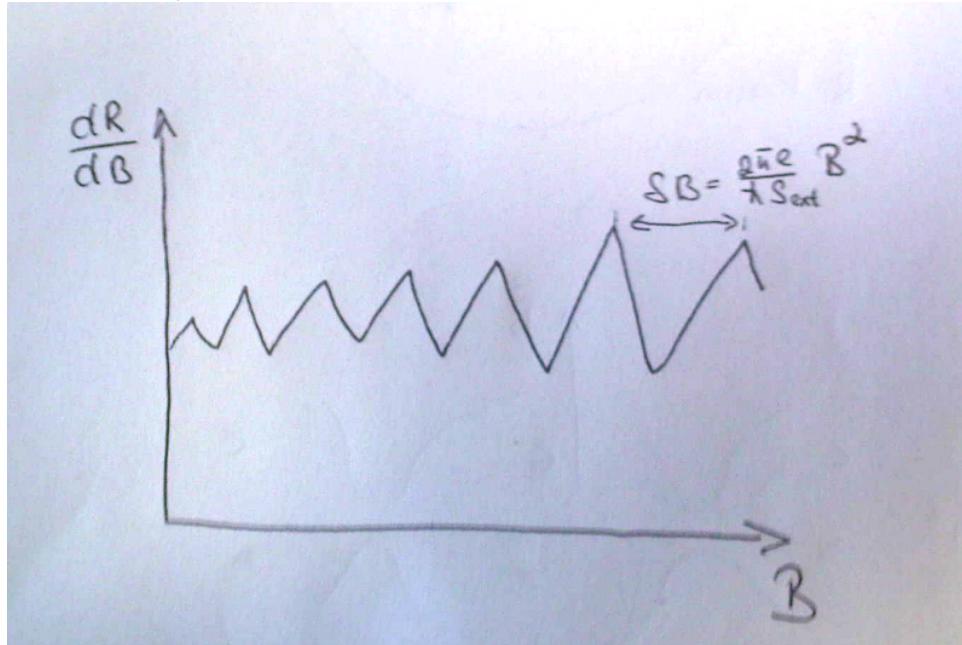
Coulomb-Eichung  $\vec{A} = (0, xB, 0)$  Landau-Eichung  $\vec{A} = (-yB, 0, 0)$  oder  $-\frac{yB}{\gamma}, \frac{xB}{2}, 0$

Eigenwerte:  $E = E_l + E(k_z) = (l + \frac{1}{2})\hbar\omega_c + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}$  mit  $l$  als Quantenzahl

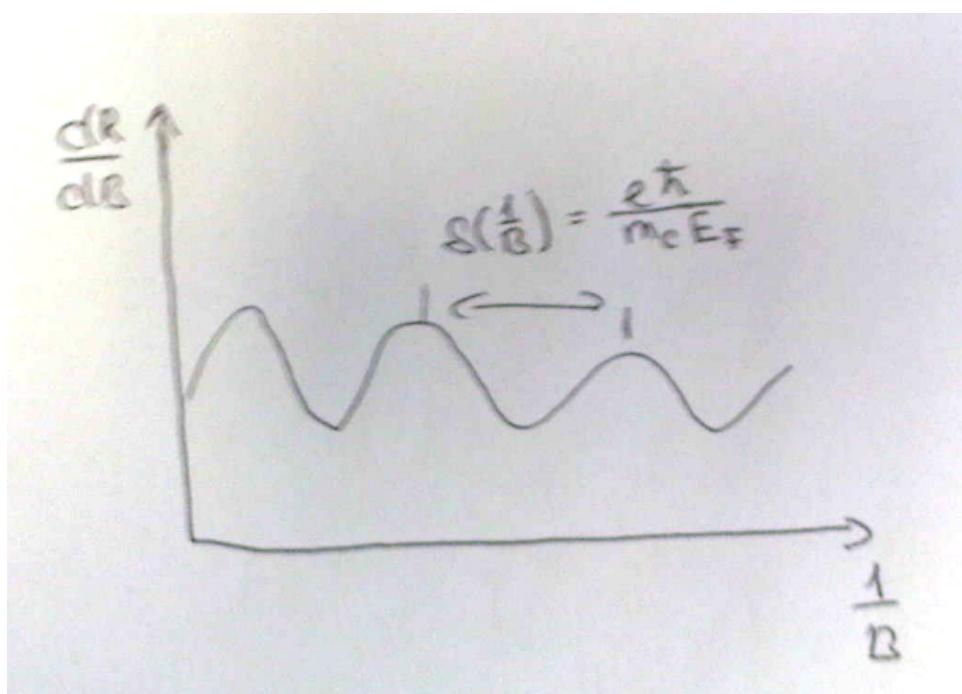
Landau-Röhren (Zylinderoberflächen im  $\vec{k}$ -Raum):  $\frac{\hbar^2(k_x^2+k_y^2)}{2m}$

$$\sqrt{k_x^2 + k_y^2} = \left[ \frac{2m}{\hbar} (l + \frac{1}{2}) \omega_c \right]^{\frac{1}{2}} = \left[ \frac{2eB}{\hbar} (l + \frac{1}{2}) \right]^{\frac{1}{2}} ; \Rightarrow r_l = \left[ (l + \frac{1}{2}) \frac{2\hbar}{eB} \right]^{\frac{1}{2}}$$

$k \Leftrightarrow r$  Faktor  $\frac{\hbar}{eB}$



$$\delta B = \frac{2\pi e}{\hbar S_{ext}} B^2$$



$$\delta \frac{1}{B} = \frac{e\hbar}{m_c E_F}$$

# Chapter 11

## Halbleiter

### Charakteristika:

- Metallischen Glanz aber kein Metall
- Negativer Temperatur Koeffizient  $\rho \uparrow \quad T \downarrow$
- Photoleitfähigkeit
- Eigenschaften können von Verunreinigungen empfindlich abhängen

Materialien: 4.hauptgruppe: Si,Se, Ga,Teller, P, B, Verbindungen III-V: GaAs, InSb II-VI: ZnS,CdS IV-IV: SiC

### Elektrischer Widerstand

Metall  $\rho = 10^{-7}$  bis  $10^{-8} \Omega m$  isolator  $\rho > 10^{12} \Omega m$  Halbleiter  $\rho = 10^{-4}$  bis  $10^7 \Omega m \exists$  Bandlücke, kleiner als bei Isolatoren bei  $T=0$  Halbleiter sind Isolatoren  $T > 0$  Wahrscheinlichkeit für eine Termische Anregung  $E_g > 0,1 \dots 2 eV \quad E \propto e^{-\frac{E_g}{2kT}}$

Intrinsische Halbleiter: Eigenschaften werden durch Thermische anregung bestimmt Extrinsische Halbleiter: Eigenschaften werden durch Dotierung von Frembatomen bestimmt

### 1) Intrinsische HL

- a) Bandlücke und optische Abstände Indirekter Übergang Impuls wird durch Phonon gewährleistet; Kristallimpulserhaltung Übergang hängt von Phononenspektrum ab und daher von der Temperatur abhängig. Photon: große Energie, kleiner Impuls; Phonon: kleine Energie, großer Impuls  
Direkter Übergang  
schwache Temperaturabhängigkeit (vgl  $1500nm \approx 0,8eV$ )
- b) Effektive Massen von Elektronen und Löchern  
Bandkrümmung in der Nähe des Übergangs;; Parabolische Näherung:

$$E_n = E_L + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$$

mit n=Elektronen und p=Löcher. Elektronen im Leitungsband im

Transversal      Longitudinal

$$\begin{array}{ll} \text{Si} & \frac{m_t^*}{m_e} = 0,19 \quad \frac{m_l^*}{m_e} = 0,19 \\ \text{Ge} & \frac{m_t^*}{m_e} = 0,082 \quad \frac{m_l^*}{m_e} = 1,57 \end{array}$$

Transversal      Longitudinal

Löcher im Valenzband    Si       $0,16mc$        $0,49mc$   
                               leicht Loch      schweres Loch

Transversal      Longitudinal

*GaAs*    Löcher     $\frac{m_t^*}{m_e} = 0,12$      $\frac{m_l^*}{m_e} = 0,61$   
                              leicht                        schwer  
                              leicht Loch      schweres Loch

### c) Metall-Halbleiter Übergang

Austrittsarbeit  $\phi$  zum Vakuum. Die Austrittsarbeit bestimmt die el. Eigenschaft.

n-Dotiert:  $\phi_{HL} > \phi_{ME}$  ohmscher Kontakt  $\phi_{HL} < \phi_{ME}$  blokierender Kontakt (Schottky-Kontakt).

An der Grenzfläche entsteht eine Hochohmige Verarmungszone. Elektronen fließen ins Metall

p-Dotiert: genau andersherum

## 2) Dotierte HL

- a) Spezifischer Widerstand hängt von der Konzentration der Verunreinigung ab.
- b) Donatoren: liefern zusätzliche Elektronen ins Leitungsband: P, As, Sb; haben eine höhere Valenz  
Akzeptoren: liefern zusätzliche Löcher in Valenzband. niedrigere Valenz als das Wirtsmaterial: B, Al, Ga, In  
Modell: Donator verhält sich wie ein positiv geladenes Ion mit zusätzlichen Elektronen. Bohr-Radius somit größer als beim H-Atom; Bindungsenergie  $\approx 10\text{meV}$

## 3) Inhomogene HL

- a) p-n Übergang
  - Angleichung des chem. Potentials ( $E_F$ )
  - Verarmung freier Ladungsträger im Bereich des Übergangs durch Rekombination mit Ladungsträgern von anderen Typ.
  - geladenen Störstellen bleiben zurück, es entwickelt sich eine Raumladungszone
- b) Schottky-Motell  
Kastenförmiger Verlauf der Raumladungs-Zone;  $V(x)$  = Potentialverlauf, in y, z  $\propto$  ausgedehnt Poisson Gl:

$$\Delta V(x) = \frac{-\rho(x)}{\epsilon_0}$$

selbstkonsistenzproblem:  $\rho(x)$  hängt von  $V(x)$  und umgekehrt ab. Iterativ  $\rho(x) \rightarrow V(x) \rightarrow \rho(x)$   
Dicke der Raumladungszone  $eV_D \simeq E_g \approx 1\text{eV}$ ,  $n = 10^{10}$  bis  $10^{24}$ ;  $d = 1\mu\text{m}$  bis  $10\text{nm}$ ; vergl. Atom-Atom  $\epsilon \approx 10^{10} \frac{\text{V}}{\text{m}}$

### c) Ströme in Gleichgewicht

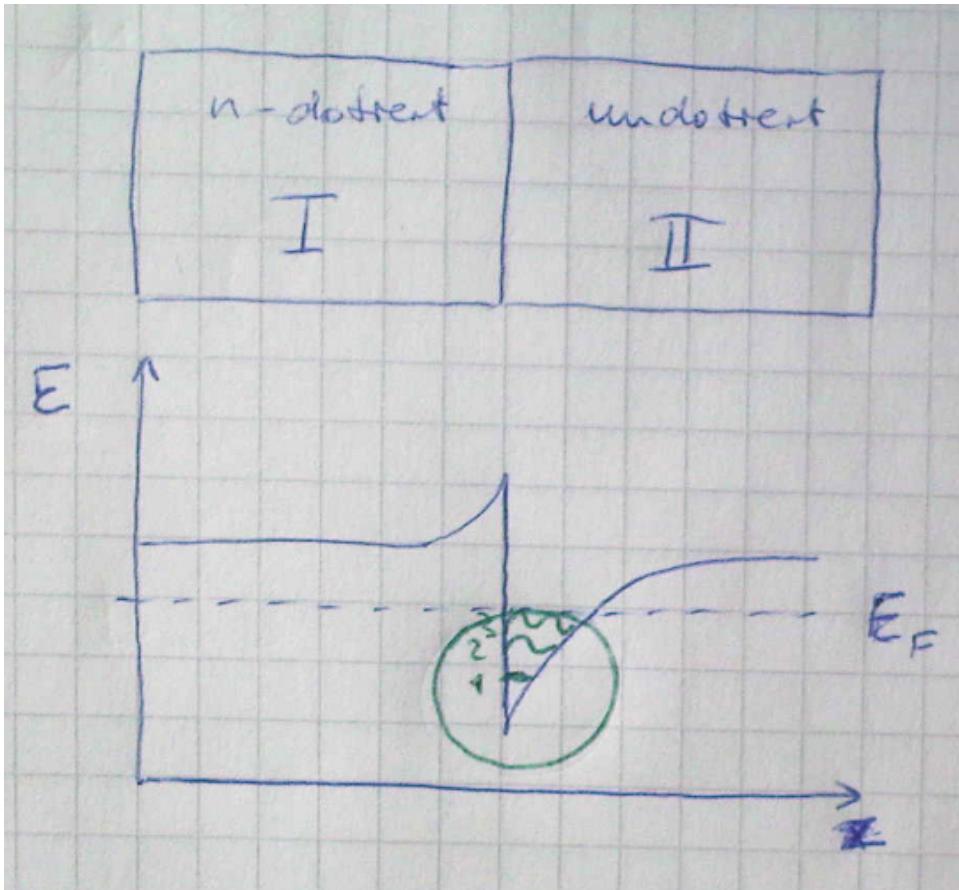
Diffusionsstrom. Elektronen aus dem n-HL rekombinieren mit Löchern p-HL  $\Rightarrow$  Ladungsfeldstrom: Elektronen aus dem p-HL (Minoritätsladungsträger) werden durch das E-Feld in n-HL im Gleichgewicht heben sie sich auf.

Ph Übergang unter Spannung

- $E_F + eU$  muss ausgeglichen sein
- Durchlassrichtung U rec die Potentialdifferenz
- Sperrichtung Pot-Diff vergrößert
- Diode Durchlassrichtung große Leitfähigkeit; Sperrichtung kleine Leitfähigkeit

## 11.1 Niedrigdimensionale Elektronensysteme

z.B. Halbleiter- Heterostrukturen



'Modulation-doped heterostructure' (engl)

z.B. 3D Metalle:  $\frac{1}{k_F} \approx 1A$  2DEG  $\equiv$  '2-dimensionales elektron gas'

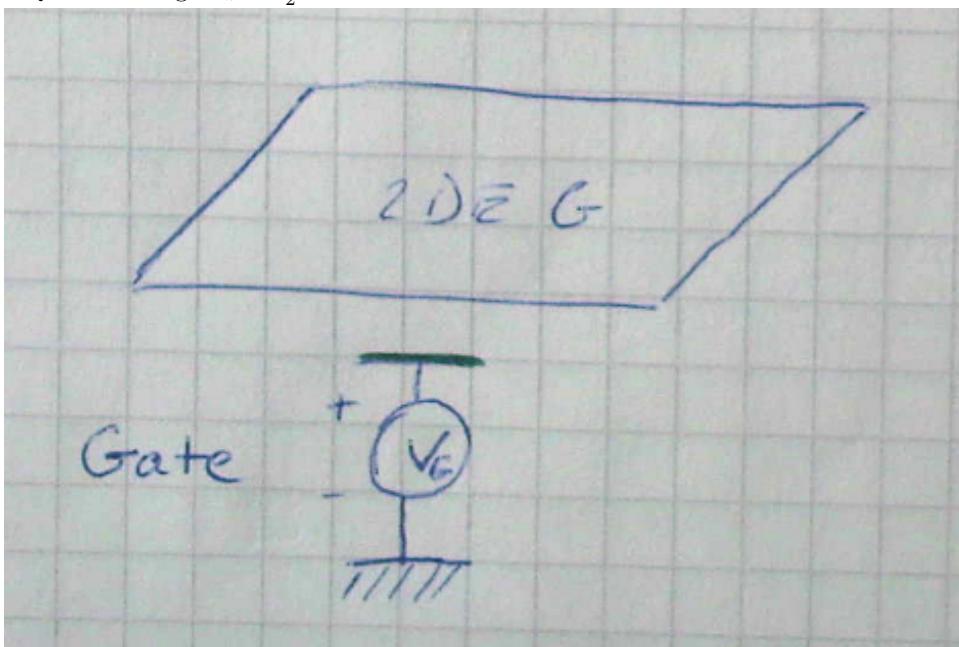
$$\frac{1}{k_F} \approx 2\pi n)^{-\frac{1}{2}}$$

mit  $n \approx 3,5 \cdot 10^{15} m^{-2} \Rightarrow \frac{1}{k} \approx 100A$

!Die Gitterkonstante I und II möglichst wenig unterscheiden. z.B. AlGaAs/GaAs:

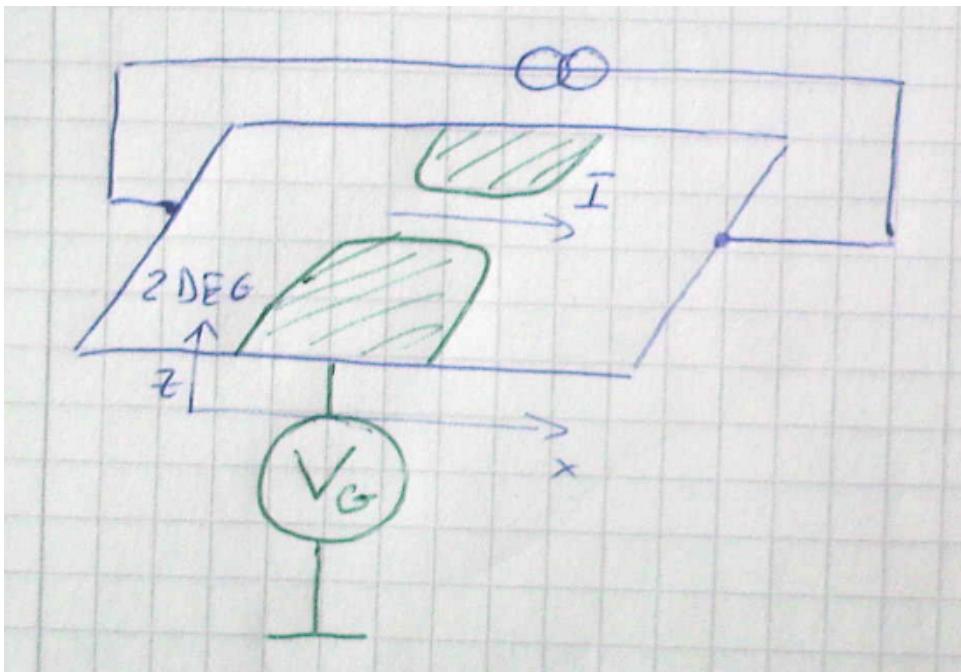
'mobility' [ $\mu$ ] (engl) Beweglichkeit:  $u = \frac{|\vec{v}|}{\epsilon} = \frac{e\tau_D}{m^*} \rightarrow$  bis zu  $10^7 \frac{cm^2}{Vs}$

z-Quantisierung:  $L_z \approx \frac{\lambda_F}{2} \approx 100A$



$E_F$  turnalbe by Gate

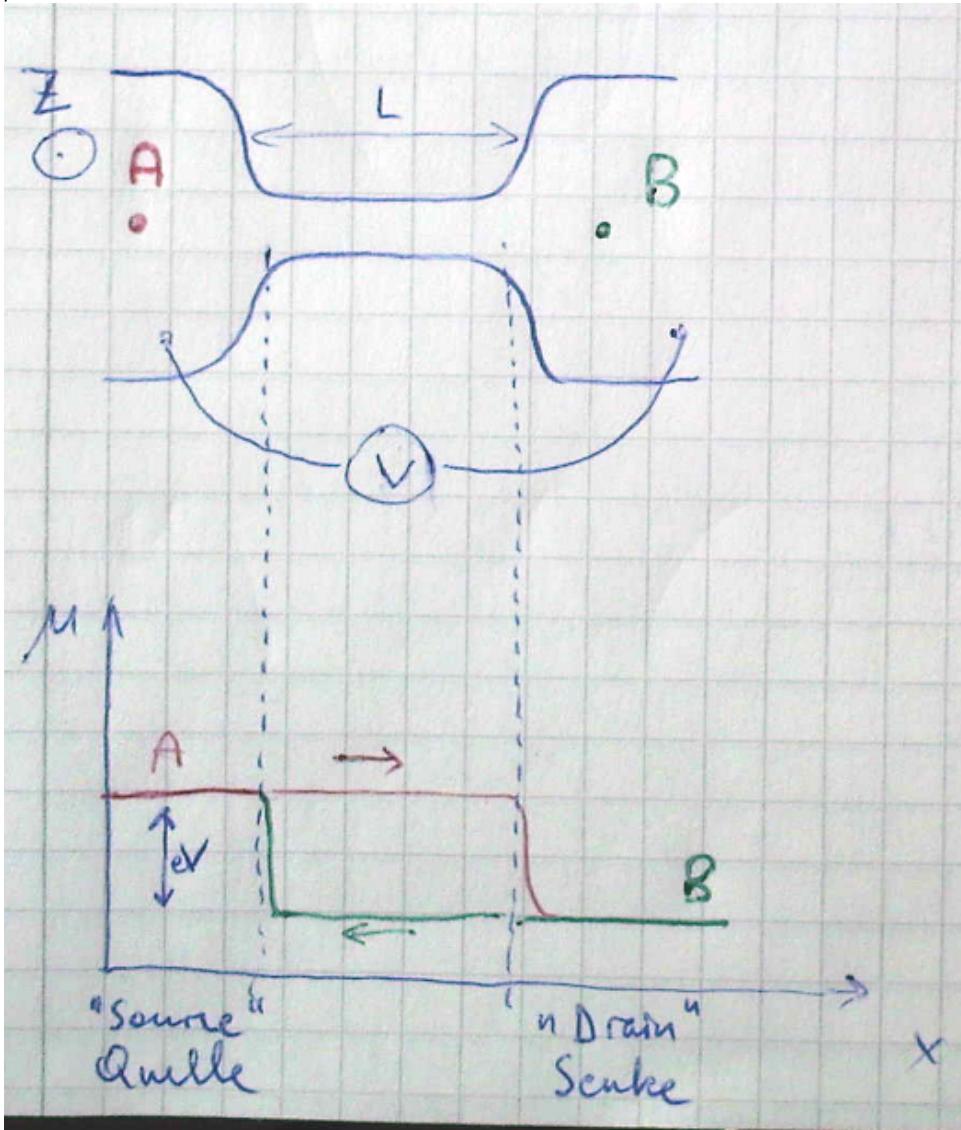
1D system: 1D Kanal  $\rightarrow$  Quantisierung in y-Richtung



'Ballistic quantum wire' → 1D Leiter

Im Draht treten keine Streuprozesse auf und die Bewegung der e-nen erfolgt ballistisch (ohne Streung ohne WW).

$\mu$ -Elektrochemisches Potential:



$$\Delta\mu = eV$$

Strom :

$$I = ne\langle v \rangle \quad (11.1)$$

$$= \frac{1}{L} \sum_k ev_k \quad (11.2)$$

$$= \frac{1}{L} \int_0^\infty \rho_k^{1D} ev_k \left[ f(E + \frac{eV}{2}) - f(E - \frac{eV}{2}) \right] dk \quad (11.3)$$

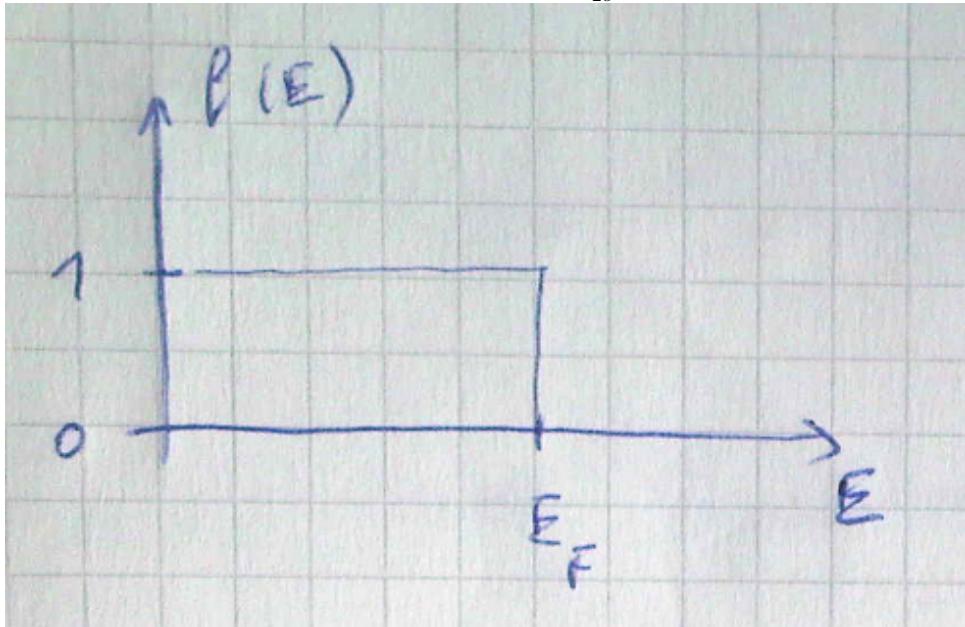
$$= \int_0^\infty \frac{e}{\pi \hbar} \frac{1}{\partial k} \frac{\partial E}{\partial k} dk \cdot eV \quad (11.4)$$

$$= \frac{2e^2}{h} V \quad (11.5)$$

mit  $\rho_k^{1D} = \frac{2L}{2\pi}$ ;  $v(k) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E(k)}{\partial k}$   
'conductance quantization'

$$\frac{I}{V} \Big|_{1 \text{ Kanal}} = \frac{2e^2}{h}$$

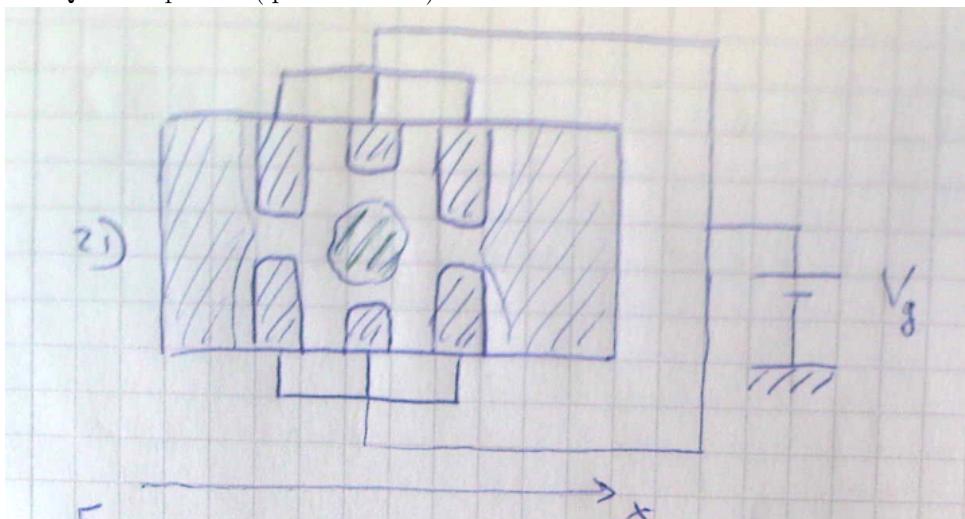
Leitwertsquantum; Widerstandsquantum:  $R_Q = \frac{h}{2e^2} = 12,906k\Omega$

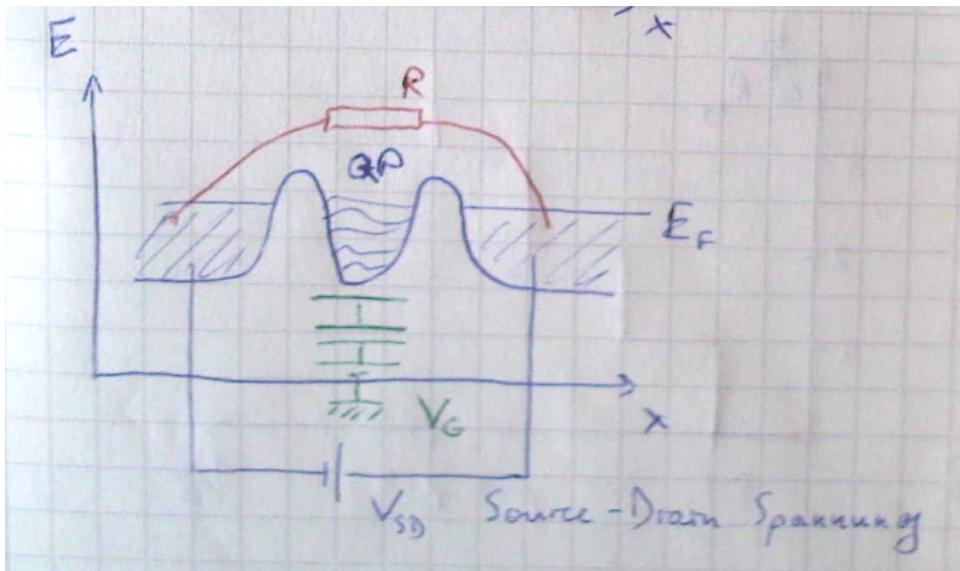


für eine Spinrichtung:  $R_Q^\uparrow = R_Q^\downarrow = 25,812k\Omega$

## 11.2 Niedrigdimensionale elektronensysteme: 0D; 2D

0D: Quantumpunkte (quantum dots)



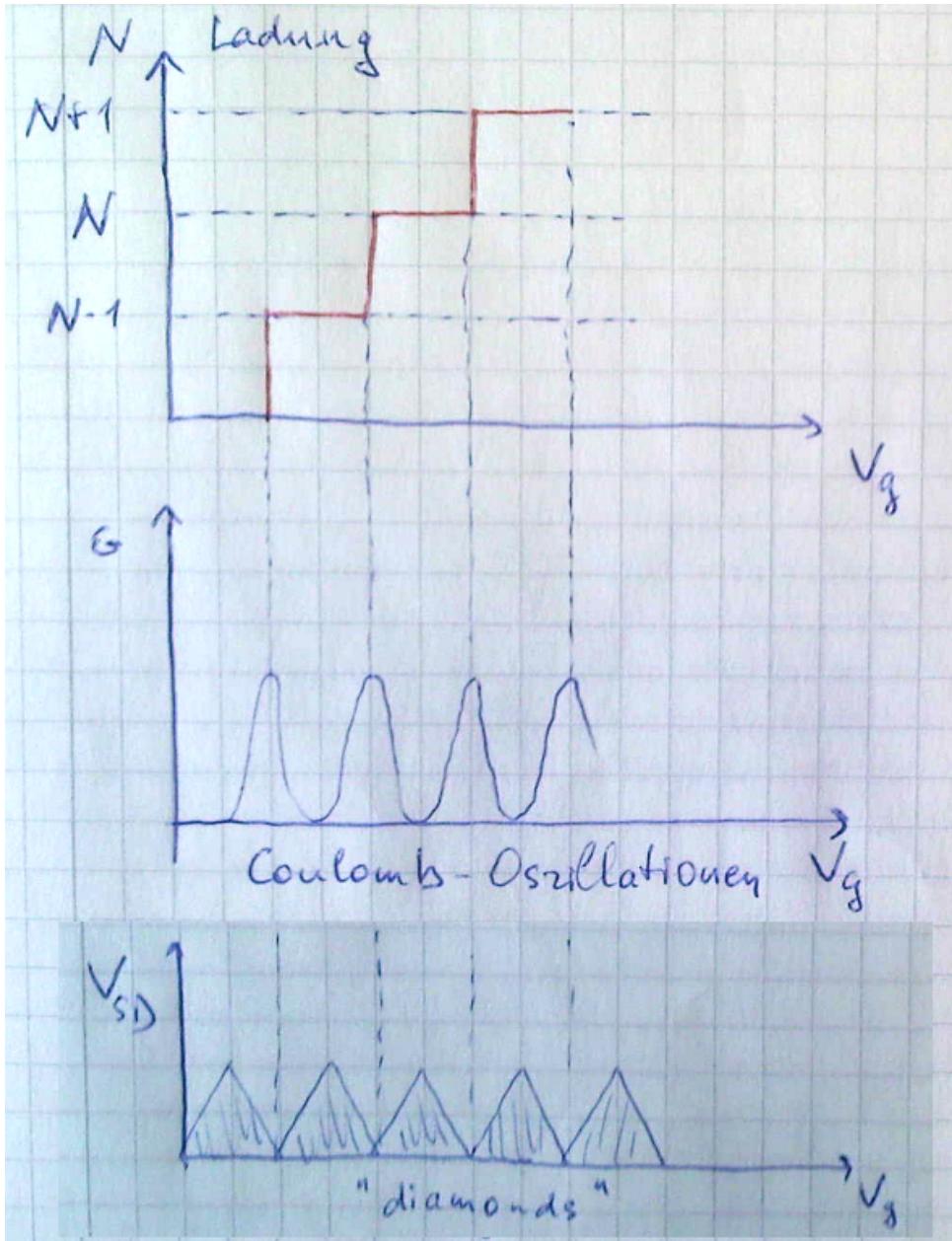


Die elektrostatische Energie:  $E(N)$ ,  $N$  ist die Zahl der e-nen auf dem Quantenpunkt (QP).

$$E(N) = \frac{(Ne)^2}{2C} - \phi Ne$$

mit  $\phi \propto V_g$  ist das elektrostatisches Potential  $C \propto C_g$ ,  $E(N)$  umso größer ist, je kleiner der QP und somit  $C$  ist.  
 Ladeenergie:  $E(N+1) = E(N); (2N+1)e^2 = 2C_g e V_g; V_g = \frac{e}{C_g}(N + \frac{1}{2})$

## 11.2 Coulomb-Blockade



Die Energie  $\frac{e^2}{2C} = E_C$  muss bei der Gate-Spannung  $V_g = \frac{eN}{C_g}$  aufgebracht werden, wenn 1e hinzugefügt (oder entfernt) werden soll.

Wenn Source und drain sind gekoppelt mit dem Widerstand  $R \rightarrow$  Zeitskale  $\delta t \approx RC$

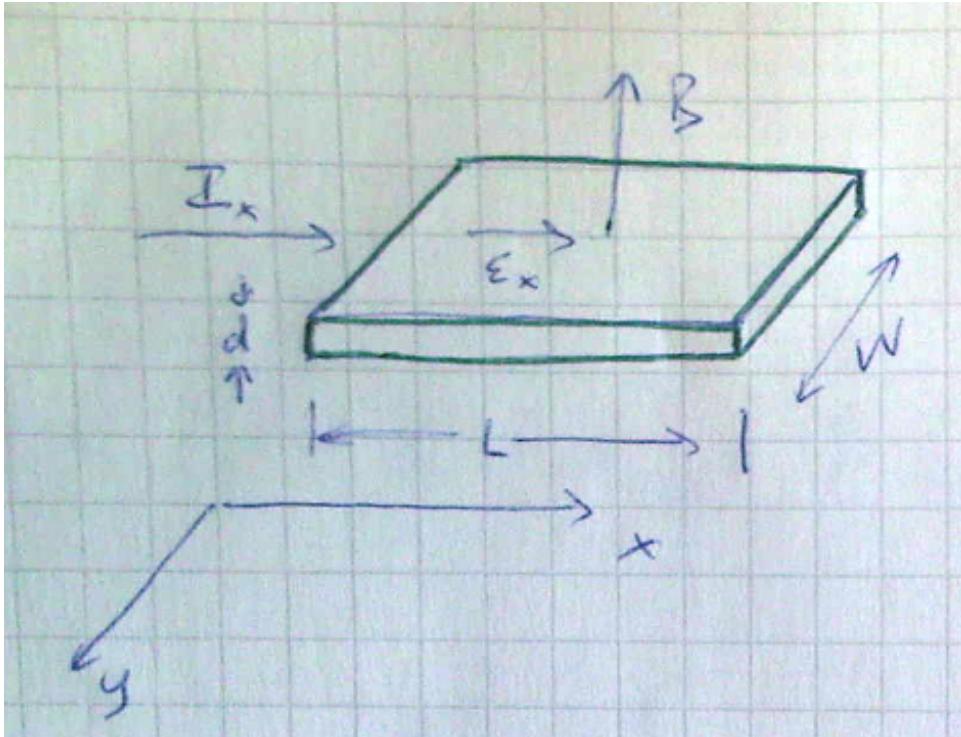
$$\delta E = \frac{h}{\delta t} \simeq \frac{h}{RC} = \underbrace{\frac{e^2}{c}}_{\propto E_C} \frac{h}{e^2} \frac{1}{R} = E_C \frac{R_Q}{R}$$

$$R_Q^\uparrow = \frac{h}{e^2} = 25812 \Omega$$

→ Fluktuationen den Coulomb-Ladeeffekt ausschmieren. Bedingungen für die Beobachtung:

- $R \gg R_Q \frac{h}{e^2}$
- $\frac{e^2}{C} \gg k_B T$

### 11.3 Quanten-Hall-Effekt in 2DEG



$$m\dot{\vec{v}} = -e(\vec{\mathcal{E}} + \vec{v} \times \vec{B}) - \frac{mv}{\tau}$$

$$v_x = -\frac{e\tau}{m}(\mathcal{E}_x + v_y B)$$

$$v_y = -\frac{e\tau}{m}(\mathcal{E}_y + v_x B)$$

$$\rightarrow v_y = \begin{pmatrix} \mathcal{E}_x \\ \mathcal{E}_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \rho_{xx} & \rho_{xy} \\ \rho_{yx} & \rho_{yy} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_x \\ j_y \end{pmatrix}$$

für isotrope Materialien  $\rho_{xx} = \rho_{yy} = \frac{m}{ne^2\tau}$ ;  $\rho_{xy} = \rho_{yx} = \frac{B}{ne}$   
 Mit  $j_y = 0$ ,  $\rightarrow$  es folgt  $\mathcal{E}_y = -\frac{e\tau}{m}B\mathcal{E}_x = -\frac{1}{ne}Bj_x = R_H B j_x$ ; Hall Konstante:  $R_H = -\frac{1}{ne}$ ; Quanten-Hall-E.  
 Hall-Widerstand  $R_y = |\frac{\rho_{xy}}{d}|$   $R_x = |\frac{\rho_{xx}}{d}|$   
 Entartungsgrad für jedes Landau-Niveau:

$$g_l = \frac{LW}{(2\pi)^2} (S_{l+1} - S_l)$$

mit  $S$  als Querschnittfläche von Landaurohren in der periodischen Bedingung

$$S_l = (l + \frac{1}{2}) \frac{2\pi e B}{\hbar}$$

$$E_l = (l + \frac{1}{2})\hbar\omega_E + \frac{\hbar^2 k_{||}^2}{2m}$$

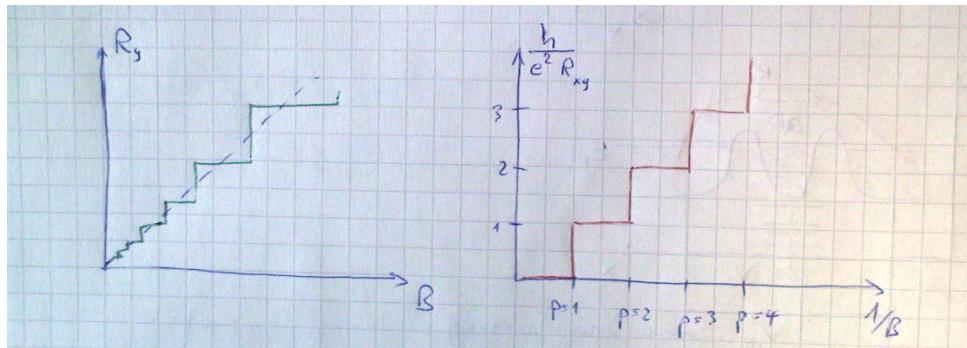
$$g_l = \frac{e}{\hbar} LW B$$

N Elektronen verteilt auf p voll besetzten Landau Niveaus:  $N = nLWd$

$$N = p \cdot g_l$$

$$D(E)|_{2D} = \frac{m}{\pi \hbar^2} = const$$

$$R_y = \rho_{xy}/d = \frac{\rho_{xy}}{ned} = \frac{BLW\emptyset}{Ne\emptyset} = \frac{LWB}{pe^2LWB} = \frac{1}{p} \frac{h}{e^2} = \frac{R_Q}{p}$$

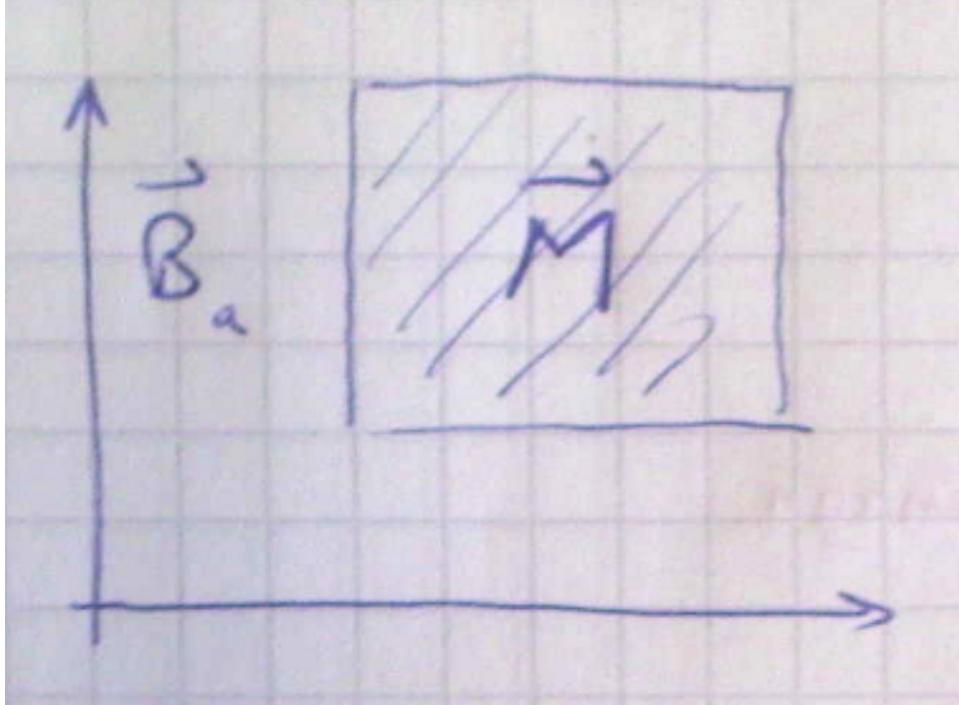


v.Klitzing entdeckt 1980, Nobel Preis 1985

## Chapter 12

# Magnetismus

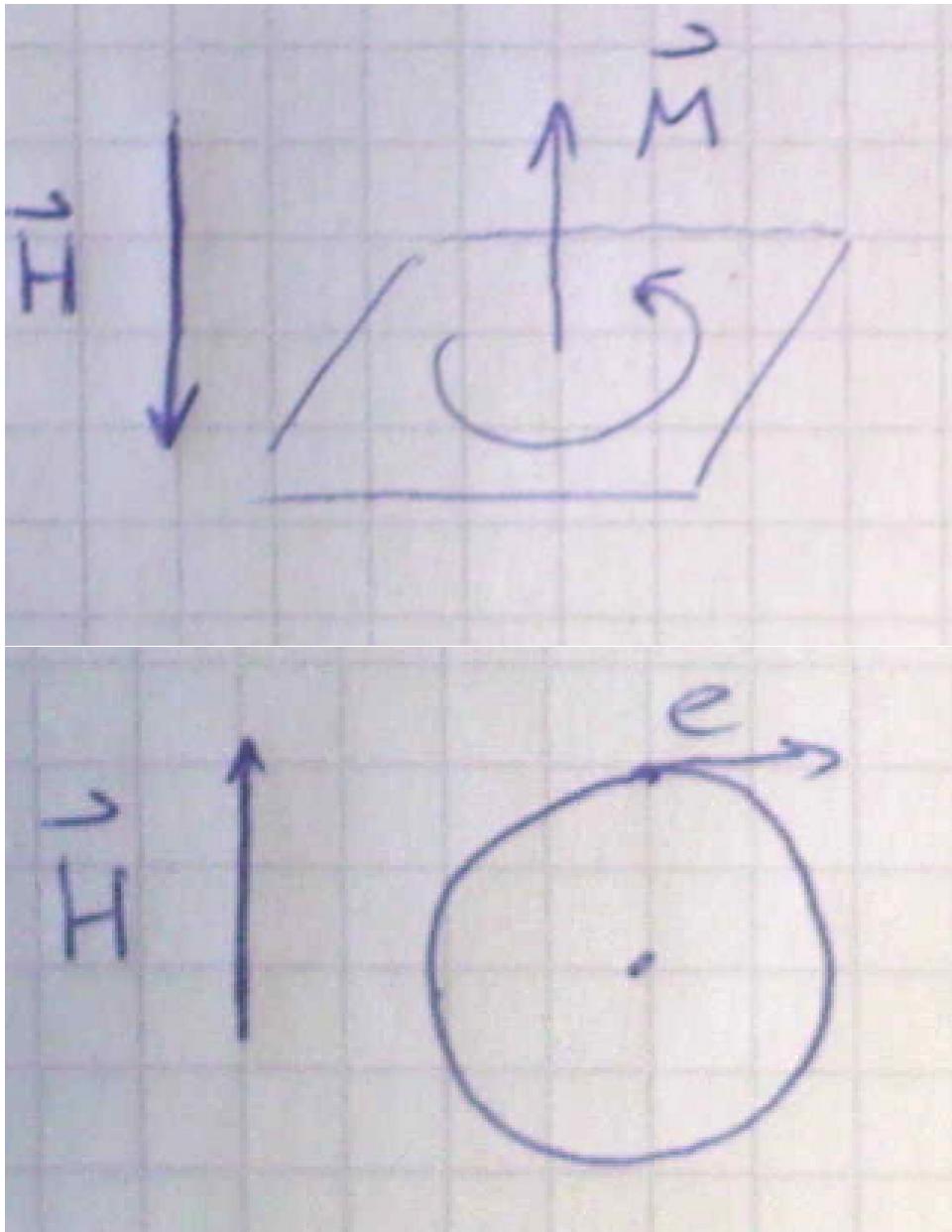
Die Magnetisierung  $\vec{M}$  ist das magnetische Moment pro Volumen.  $\vec{M} = n\vec{\mu}$ ;  $\mu$  ist mittleres Dipolmoment.



Magnetische Suszeptibilität:  $[\chi]$  Tensor

$$[\chi] \equiv \chi = \frac{\vec{M}}{\vec{H}} = \mu_0 \frac{\vec{M}}{\vec{B}}$$

Skalar (Vereinfacht)  $\chi = \frac{M}{H}$ ;  $\chi < 0$ : diamagnetische Festkörper;  $\chi > 0$ : paramagnetische Festkörper



$$\text{Lenz-Regel } I \propto \frac{d\phi}{dt}$$

## 12.1 Diamagnetismus

Diamagnetismus ist eine Schwächung des äußeren Feldes. Klassische (Langevin) und quantenmechanische Behandlung. Beide kommen zu gleichen Resultaten.

$$\chi_d|_{\text{Atome}} \propto 10^{-6} \text{ bis } 10^{-7}$$

$$\chi_a|_{\text{Atome}} = -\frac{\hbar\mu_0 e^2}{6m_e} Z \langle r^2 \rangle$$

mit  $Z$  Elektronenzahl und  $\langle r^2 \rangle$  mittlerer abstandsquadrat der e-nen

## 12.1 Diamagnetismus freier Elektronen: Landau-Diamagnetismus

1930 Landau-Quantisierung  $\frac{\hbar(k_x^2 + k_y^2)}{2m_e} = (l + \frac{1}{2})\hbar\omega_c; l = 0, 1, 2, 3, \dots$  B-Feld in z-Richtung.  
mit  $\chi = -\frac{\partial^2 F}{\partial H^2}$

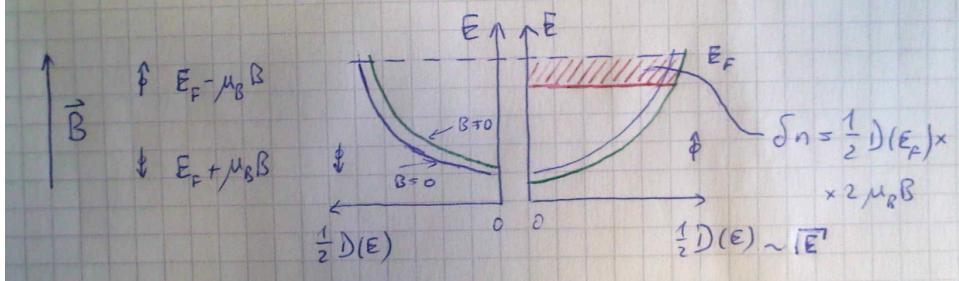
$$F = k_B T \ln \sum_{\text{alle Zustände}} e^{-\frac{iE}{k_B T}}$$

$$\chi_d|_{\text{Landau}} = -\frac{1}{3}\mu_B^2\mu_0 D(E_F) = -\frac{1}{3}\mu_B^2\mu_0 \frac{3}{2} \frac{n}{E_F} = -\frac{n}{2E_F}\mu_0\mu_B^2 \propto 2 \cdot 10^{-7}$$

mit dem Borsches Magneton  $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e}$  und Zustandsdichte  $D(E_F)$

## 12.2 Paramagnetismus

Paramagnetismus freier Elektronen ist allgemein bekannt als Paulische Spin Suszeptibilität.



Roter Bereich  $\delta n$  kommt dazu, es gibt insgesamt mehr Elektronen

$$\delta n = \frac{1}{2}D(E_F)2\mu_B B$$

$$M = \delta n \mu_B = \mu_B^2 B D(E_F)$$

$$\chi_P|_{\text{Pauli}} = \mu_B \frac{M}{B} = \mu_0 \mu_B^2 d(E_F) = -3\chi_d|_{\text{Landau}}$$

$$\boxed{\chi_P|_{\text{Landau}} = -\frac{1}{3}\chi_d|_{\text{Pauli}}}$$

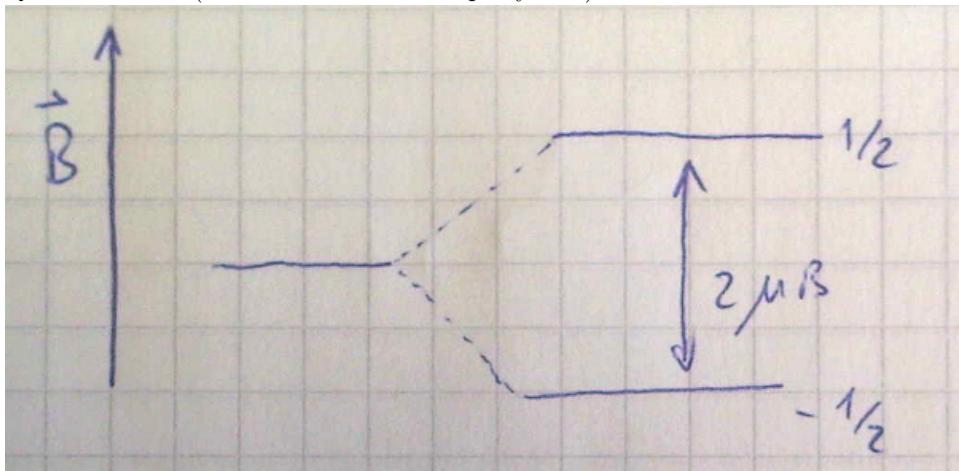
## 12.2 Paramagnetismus von Ionen

Aus der Atomphysik:  $\vec{\mu} = -g\mu_B \vec{J}'$  mit  $g$  Lande-Faktor  $\vec{J}'\hbar\vec{J}$  Gesamtdrehimpuls des Atoms

$$\hat{J} = \hat{L} + \hat{S}$$

$$g = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}$$

$L$ -Bahndrehimpulsquantenzahl und  $S$ -Spinquantenzahl  
Quantentheorie ( nur für Zwei-Niveau-Spinsystem)



$$V = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = \underbrace{m_J g \mu_B}_\mu B$$

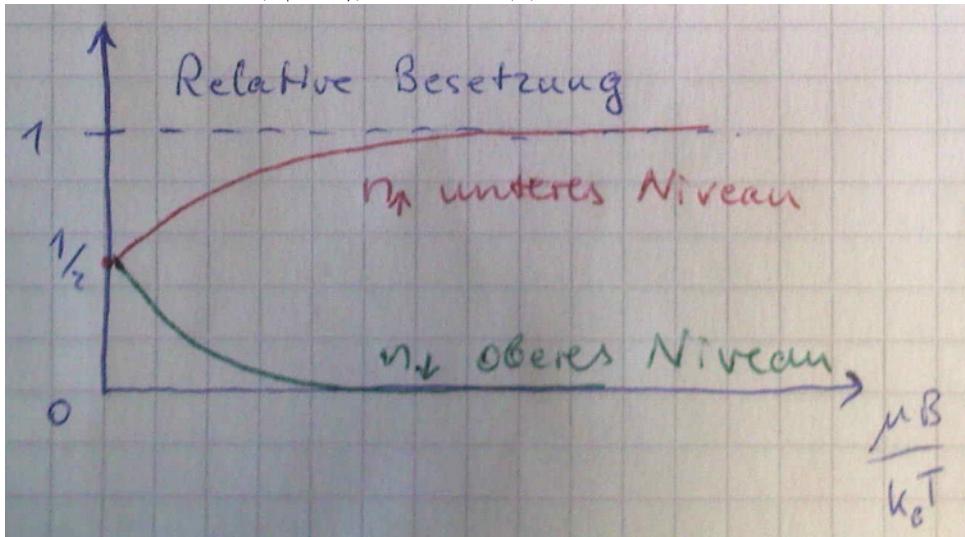
mit  $m_J = \pm \frac{1}{2}$ ;  $g = 2$ ;  $V = \pm \mu_B B$

Im Gleichgewicht für  $T \neq 0$ ; Faktor  $x = \frac{\mu B}{k_B T}$

$$\frac{n_\uparrow}{n} = \frac{e^x}{e^x + e^{-x}}$$

$$\frac{n_\downarrow}{n} = \frac{e^{-x}}{e^x + e^{-x}}$$

Magnetisierung  $M = (n_\uparrow - n_\downarrow)\mu = n\mu \tanh(x)$



für  $x \ll 1$  (hohe T)  $\tanh(x) \propto x$

$$M \approx n\mu \frac{\mu B}{k_B T}$$

Curie-Gesetz:

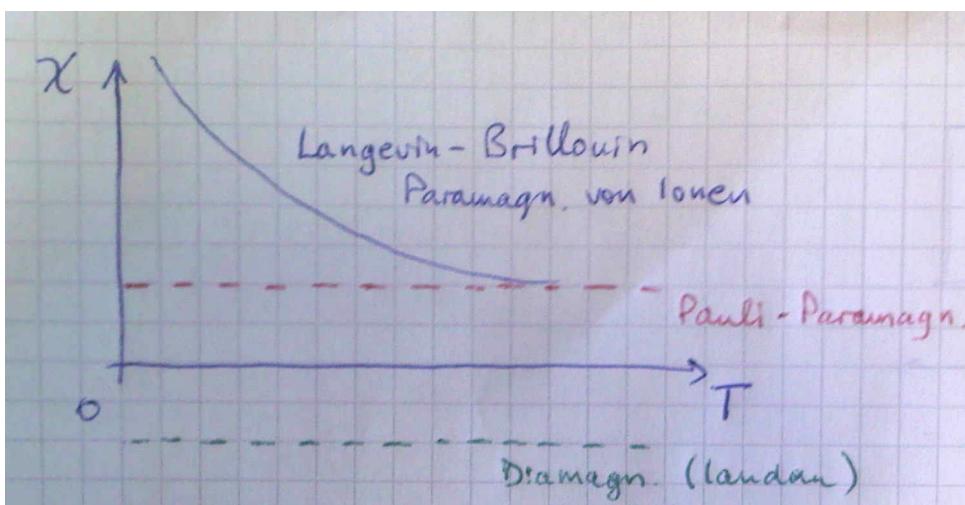
$$\chi_{pa} \approx \frac{n\mu^2}{k_B T} \mu_0 \approx \frac{1}{T}$$

Ein Atom mit Gesamtdrehimpulsquantenzahl  $J$  besitzt in einem Magnetfeld  $(2J+1)$  äquidistante Energieniveaus

$$M = ngJ\mu_B B_J(x)$$

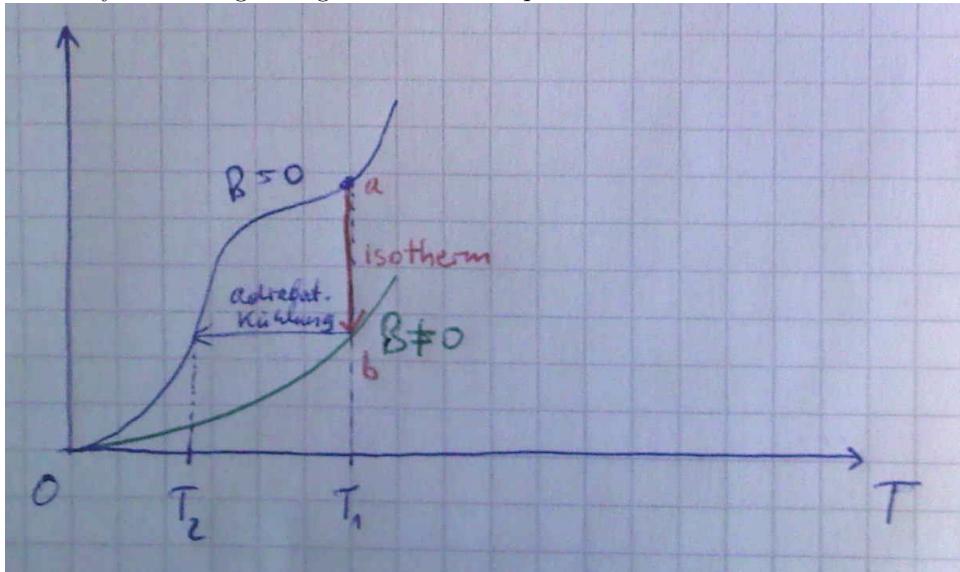
mit  $B_J(x)$  Brillouin-Funktion für  $x \ll 1$

$$\chi_{pi} = \mu_0 \frac{\mu}{B} = nJ(J+1) \frac{g^2 \mu_B}{3k_B T} \propto \frac{C}{T}$$



## 12.3 Kühlung durch adiabatische Entmagnetisierung

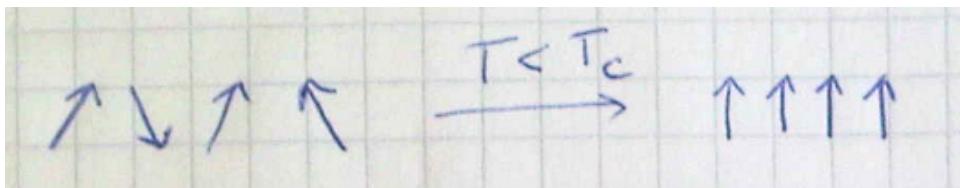
von Debye 1926 vorgeschlagen und 7 Jahre später realisiert.



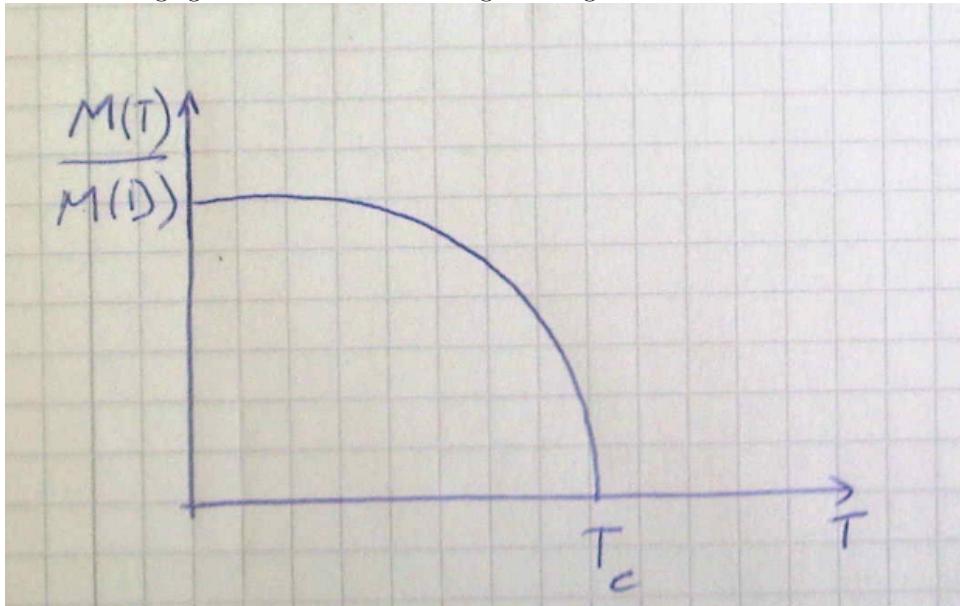
a - gute Wärmekontakt bis  $mK$  b - Probe von Umgebung isoliert  $\approx 10\mu K$  Bei Cu Kamentmagnetisierung

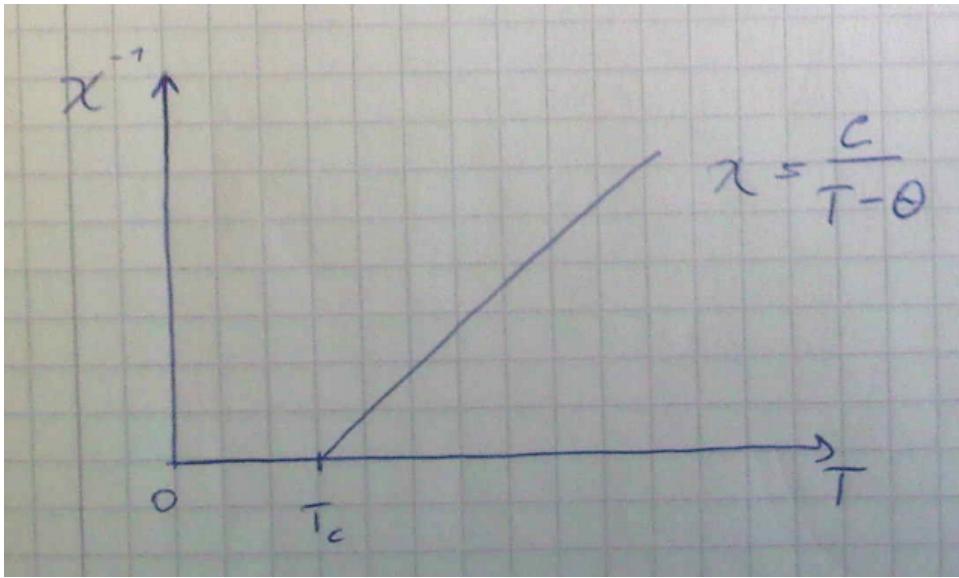
## 12.4 Ferrormagnetismus

- Spontane Magnetisierung unterhalb einer kritischen Temperatur  $T_C$



Grund: Energiegewinn durch Ausrichtung der magnetischen Momente





1) Molekularfeldänderung

$$B_{eff} = B_A + B_H = B_a + \lambda \mu_0 M$$

$\lambda$  ist die Molekularfeldkonstante mag WW für 2 Spins:  $\approx 0.1T$   $B_H \approx 1000T \Rightarrow$  nicht durch die mag WW der Spins

Magnetisierung wird durch Molekularfeld getrieben

$$M_S = ng\mu_B J B(x), \quad x = \frac{g\mu_B \lambda \mu_0 M_S}{k_B T}$$

Curie-Konstante

$$T_C = \frac{ng^2 J(J+1)\mu_B^2 \lambda}{k_B} = C \cdot \lambda$$

$$\Theta = \lambda \cdot C$$

mit  $\Theta$  paramagn Curie Temp.

$$\text{Fe: } \lambda \approx 5000, \quad M_S = 1,6 \cdot 10^6 \frac{A}{m} \quad B_M \approx 1000T$$

$$p^2 = g^2 s(s+1)$$

2) Austausch WW zwischen lokalen orten Elektronen

System 2 weiterer Ionen mit 2E (Isolator)

$$\psi(r_1, s_1; r_2, s_2) = \psi(r_1, r_2) \psi(s_1, s_2)$$

$$\psi_S = A[\psi_a(r_1)\psi_b(r_2) + \psi_b(r_1)\psi_a(r_2)]$$

Symmetrische Ortswellenfunktion  $\Rightarrow$  Spin Wellenfkt antisymmetrisch

$$\psi_A = A[\psi_a(r_1)\psi_b(r_2) - \psi_b(r_1)\psi_a(r_2)]$$

Antisymmetrische Ortswellenfunktion  $\Rightarrow$  Spin Wellenfkt symmetrisch  
WW Potential des Gesamtzustandes

$$V(r_1, r_2) = \tilde{V}(r_2, r_1)$$

Austauschkonst J

$$J = E_S - E_A \approx 4A^2 \int \psi_a^*(r_1)\psi_b^*(r_2)\tilde{V}(r_1, r_2)\psi_b(r_1)\psi_a(r_2)dV_1dV_2$$

Kinetische Energie des e-trons wird vernachlässigt

- $J > 0$  - parallele Ausrichtung des Spins
- $J < 0$  - antiparallele Ausrichtung des Spins

$$|J| = \frac{3k_B\Theta}{zs(s+1)}$$

$$\tilde{V}_{el}(r_1, r_2) = \frac{e^2}{(4\pi\epsilon_0|r_1 - r_2|)}$$

Coulomb WW versucht die Spins auszurichten.  $V_i(r_1, V_i(r_2))$ , attraktiv, negative Beitrag zu J relative Größe entscheidet über Ausrichtung der Spins

Alternativ Pauliprinzip

$S_1, S_2$  Spinoperatoren der Elektronen

$$S = |s_1 + s_2|^2 = \frac{3}{2} + 2s_1s_2$$

$s_1s_2 = -\frac{3}{4}$   $S = 0$  Singulett Zustand  $s_1s_2 = -\frac{1}{4}$   $S = 1$  Tripletzt Zustand  
Hamilton Operator für Zustand Spin System

$$H_{\text{spin}} = \frac{1}{4}(E_S + 3E_A) - (E_S - E_A)s_1s_2 \quad (12.1)$$

$$= \underbrace{\frac{1}{4}(E_S + 3E_A)}_{=0 \text{ bei geeigneter Wahl des Nullpunktes}} - Js_1s_2 \quad (12.2)$$

$$= -J_{ij}s_i s_j \quad |\text{Heisenberg Modell des Ferrormagneten} \quad (12.3)$$

### 3) Austausch WW im freien Elektronen Gas

Freies Elektronengas → Übergang Ebener Wellen

$$\psi(r_1, r_2) = A [e^{ik_1 r_1} e^{ik_2 r_2} - e^{ik_1 r_2} e^{ik_2 r_1}] \quad (12.4)$$

$$= A e^{i(k_1 r_1 + k_2 r_2)} \left[ 1 - e^{ik(k_1 - k_2)(r_1 - r_2)} \right] \quad (12.5)$$

Aufenthaltswahrscheinlichkeit  $dV_1 dV_2$

$$|\psi(r_1, r_2)|^2 dV_1 dV_2 = |A|^2 [1 - \cos(k_1 - k_2)(r_1 - r_2)]$$

Die Wahrscheinlichkeit zwei Spins mit gleichen Spin am gleichen Ort zu finden verschwindet auch ohne Coulomb WW

Austauschloch

Wenn Spins ausgerichtet sind, verringern sich die Abschirmeffekte der Ionenrümpfe und die Aufelektronen werden daher stärker gebunden. Es führt zu einem Energiegewinn.

### 3) Spinwellen (Magnonen)

Niederenergetische Anregungen, ähnlich Phononen. Eine kollektive Anregung der Bewegung  
Spinflip kostet  $\delta E = 2zJs^2$ ;  $J \approx k_B T_C$

Magnonen haben  $E = \hbar\omega$

Ausrichtung in z-Richtung. Drehmoment  $\mu \times B_M = -g\mu_B S_M \times B_M$

$$\frac{dS}{dt} = -g\mu_B S \times B_M$$

zeitliche Ableitung des Drehimpulses  $\hbar S = \text{angreifenden Drehmoment}$ .

$$U_m = -JS_m(S_{m-1} + S_{m+1}) = \mu B_M = g\mu_B S_M B_M$$

$$\frac{dS_M}{dt} = \frac{J}{\hbar} S_M \times (S_{m-1} + S_{m+1})$$

$$S_{m,x} = A \cos(mqa - \omega t)$$

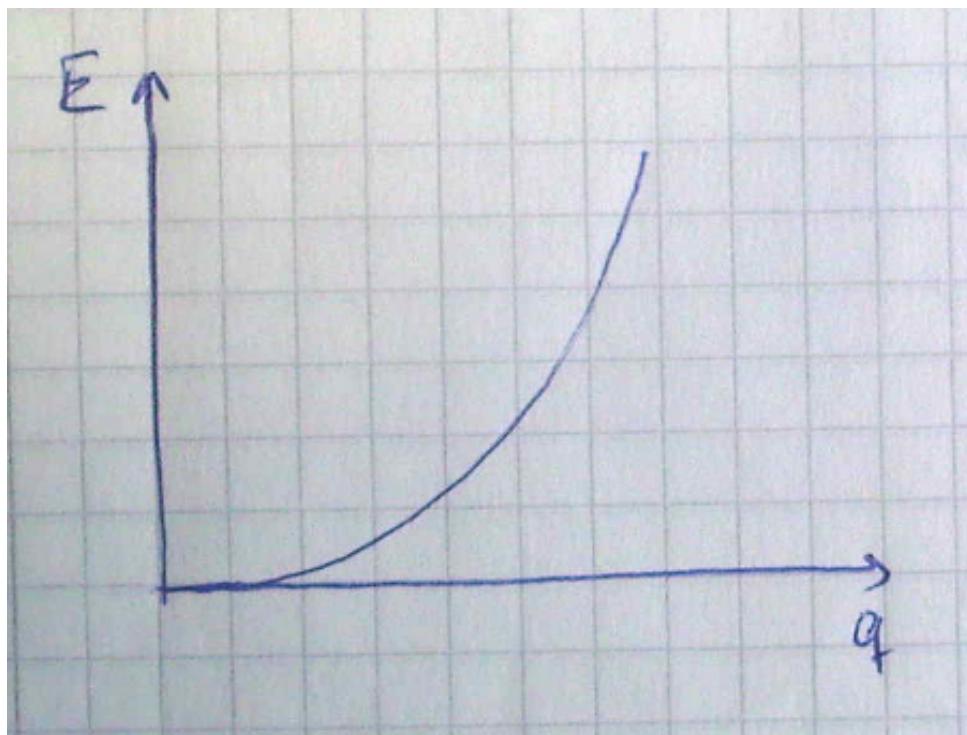
$$S_{m,y} = A \sin(mqa - \omega t)$$

$$S_{m,z} \sqrt{S^2 - A^2}$$

mit  $q = \frac{n\pi}{L}$  und  $L$  als die Länge der Kette  
Dispersionsrelation

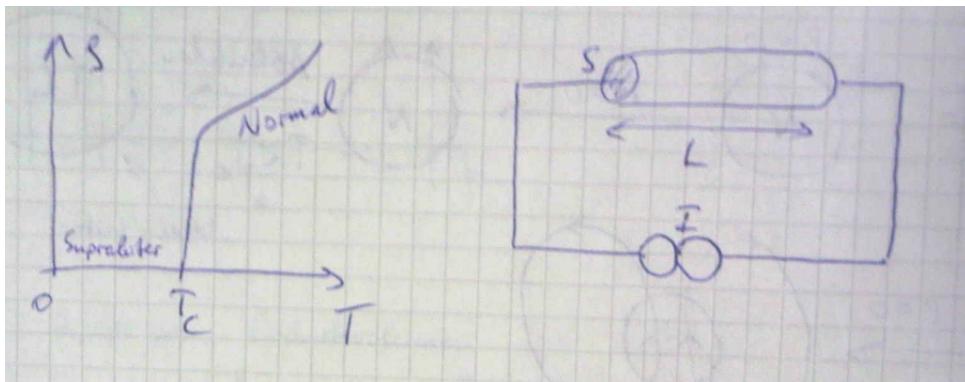
$$\omega = \frac{2JS}{\hbar} [1 - \cos(qa)] = \frac{4JS}{\hbar} \sin^2\left(\frac{ga}{2}\right)$$

$$\omega = \frac{JS}{\hbar} a^2 q^2$$



# Chapter 13

## Supraleitung



$$U = RI = \rho \frac{L}{S} I$$

$$\rho|_{Cu, T=4,2K} \approx 10^{-9} \Omega m$$

für  $\rho < 10^{-24} \Omega cm$

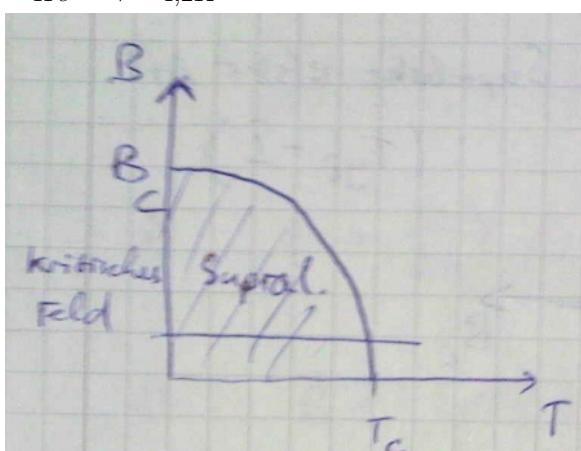
1911 Kamerlingh-Onnes

Hg:  $T_c \approx 4K$

$$N_z \rightarrow 77K$$

$$H_z \rightarrow 20K$$

$$^4He \rightarrow 4,2K$$



Al            1,2K

Im            3,4K

Sn            3,7K

Pb            7,2K

Nb            9,2K

—            —

NbN          15K

$Nb_3Ge$     24K

1986  $YBaCu_3O_7$     92

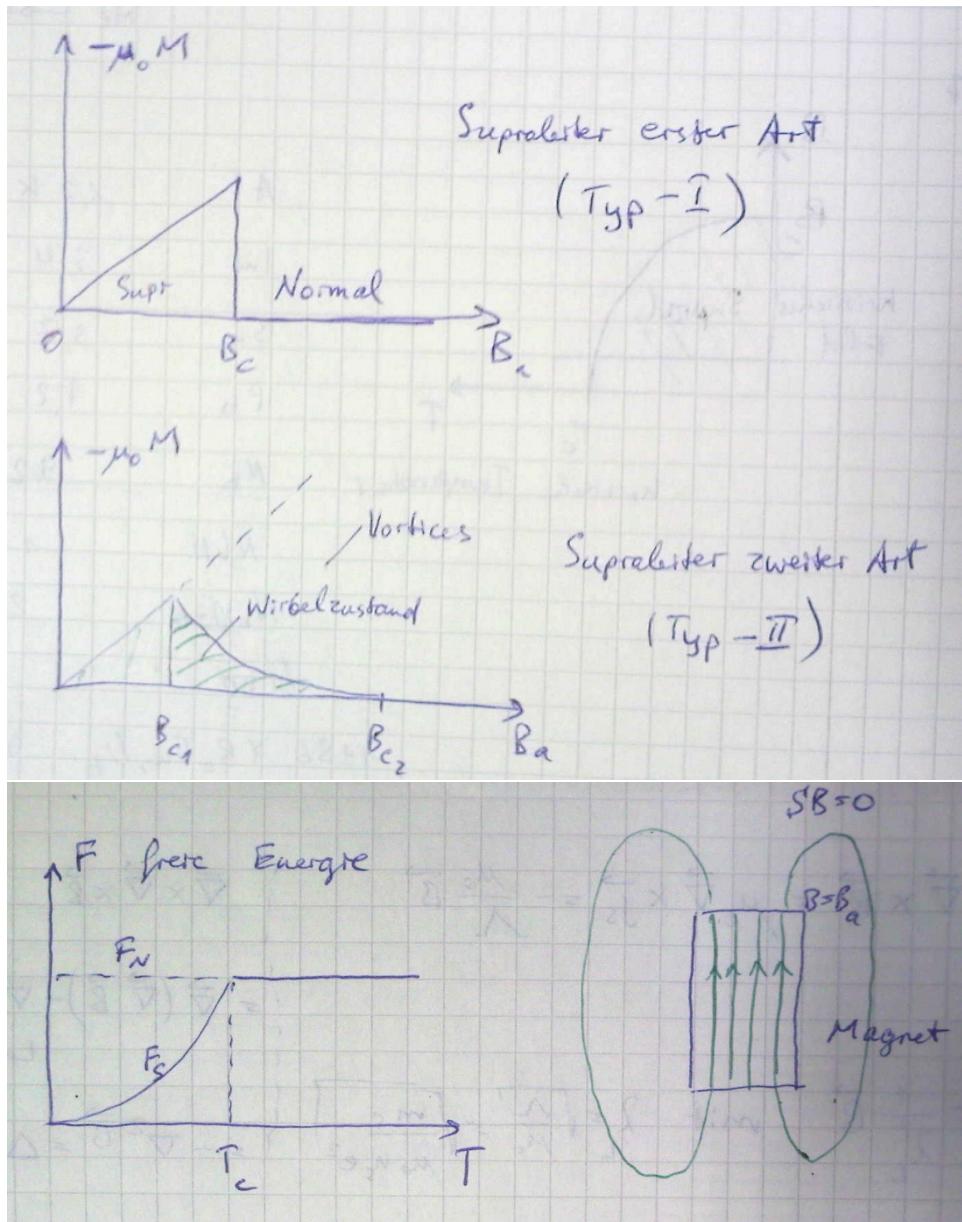
$$Tl_2Sr_2Ca_2Cu_3O_8 \rightarrow 120K$$

Supraleiter ist kein 'idealer' Leiter  $\rightarrow$  Meissner-Effekt

	$T > T_c$	$T > T_c$	
Idealer Leiter			
Supraleiter			
$B = 0$	$B \neq 0$	$B = 0$	

**Bild 11.3:** „Ideal Leiter“ und Supraleiter im Magnetfeld. Das Magnetfeld wird oberhalb der Sprungtemperatur angelegt und dringt in beide Proben ein. Beim Unterschreiten von  $T_c$  bleibt das Magnetfeld im „ideal Leiter“ gefangen, während es aus dem Supraleiter verdrängt wird. Nach dem Abschalten des Felds stellen sich zwei unterschiedliche Endzustände ein.

Quelle: Festkörperphysik (Hunklinger)



Arbeit pro Einheitsvolumen der Probe

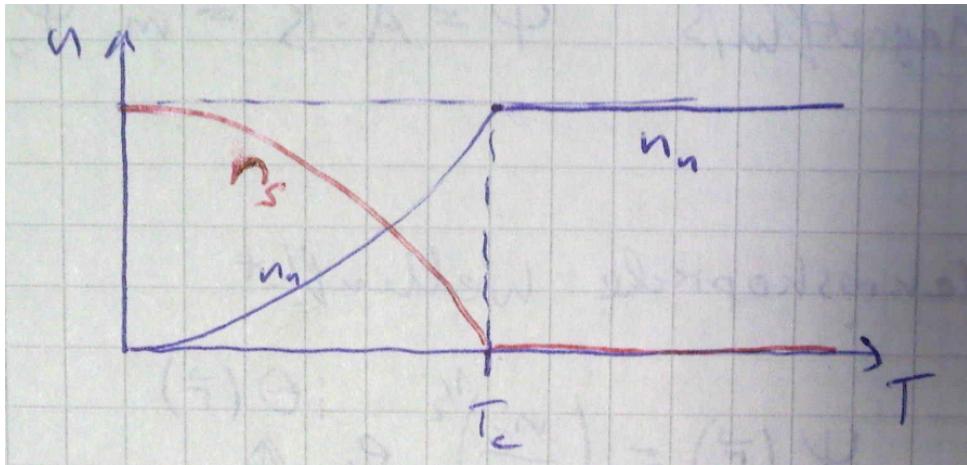
$$W = - \int_0^{B_a} \vec{M} \cdot d\vec{B}_a = \int_0^{B_a} dF_s = \frac{B_a}{\mu_0} dB_a$$

$$F_S(B_a) - F_S(0) = \frac{B_a^2}{2\mu_0}$$

### 13.1 London-Gleichungen (Postulate)

- 1)  $\vec{E} = \frac{\partial}{\partial t}(\Lambda \vec{j}_S)$  mit  $\text{Lambda} = \frac{m_s}{n_s e^2}$
- 2)  $\vec{B} = -\text{rot}(\Lambda \vec{j}_S)$

### 13.1 Zwei Flüssigkeiten-Modell

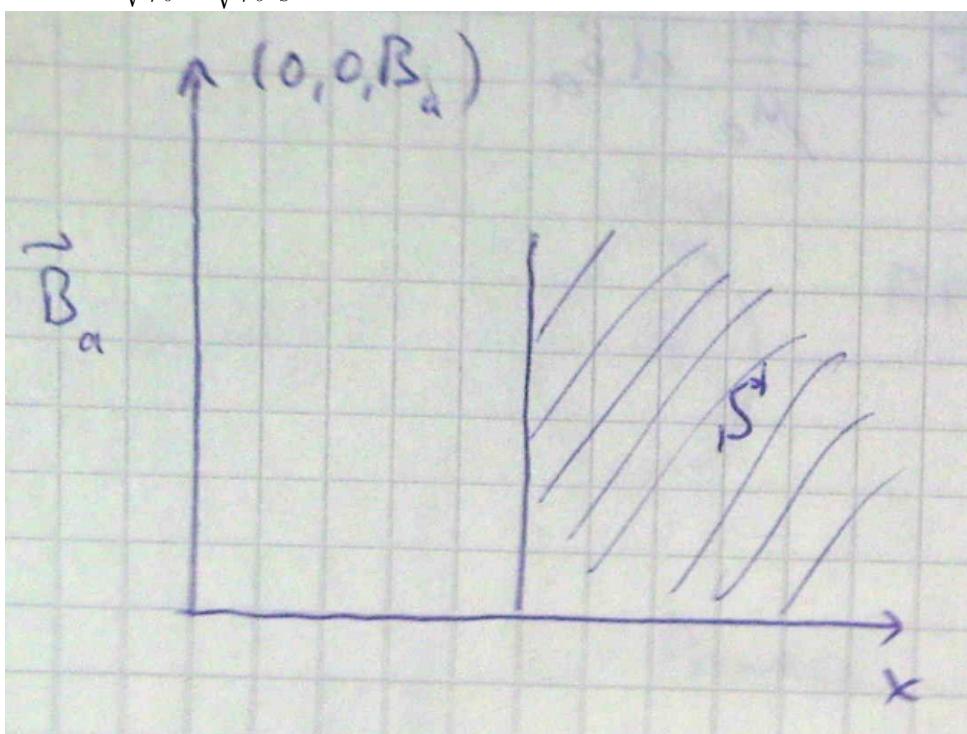


$$\vec{\nabla} \times \vec{\nabla} \times \vec{B} = \mu_0 \vec{\nabla} \times \vec{j}_S = -\frac{\mu_0}{\Lambda} \vec{B}$$

mit  $\vec{\nabla} \times \vec{\nabla} \times \vec{B} = \vec{\nabla}(\vec{\nabla} \cdot \vec{B}) - \underbrace{\vec{\nabla}^2 \vec{B}}_{\text{Laplace}} = -\vec{\nabla}^2 \vec{B} = \Delta \vec{B}$

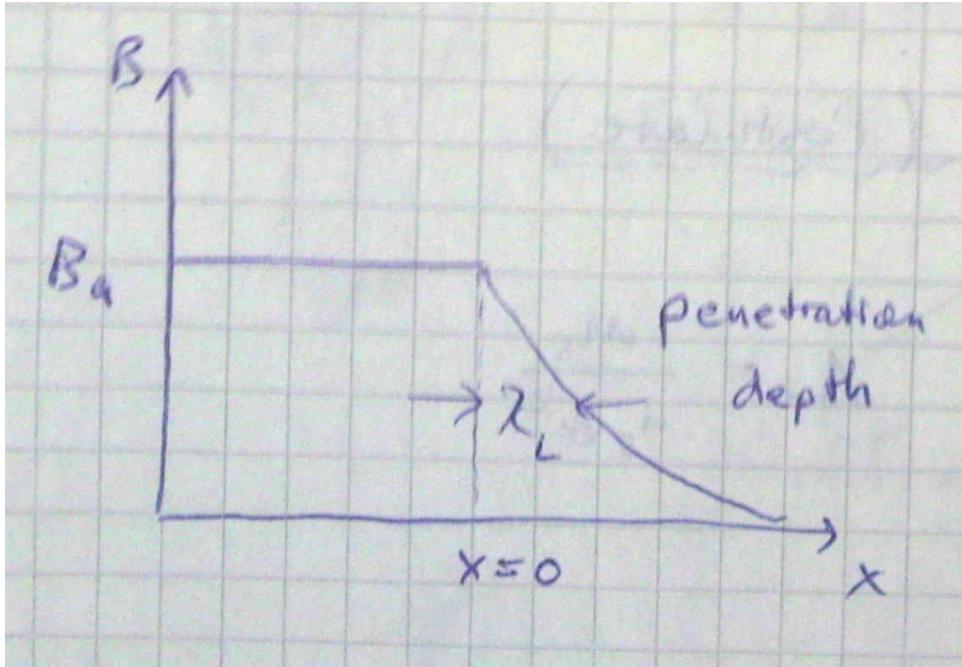
$$\nabla^2 \vec{B} = \frac{1}{\lambda_L^2} \vec{B}$$

mit  $\lambda_L = \sqrt{\frac{\Lambda}{\mu_0}} = \sqrt{\frac{m_s}{\mu_0 n_s e^2}}$  als Londonsche eindringtiefe



$$\frac{d^2B}{dx^2} = \frac{1}{\lambda_L^2} B$$

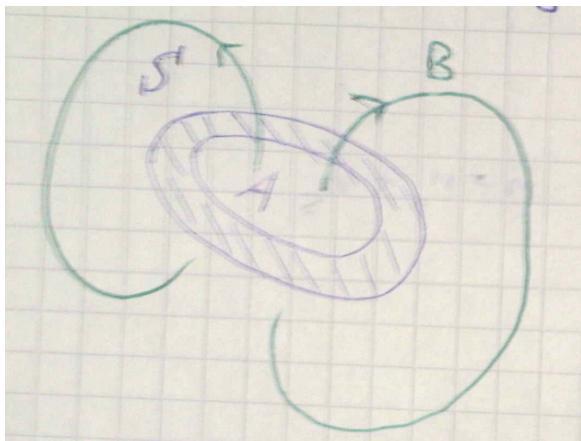
$$B(x) = B_0 e^{-\frac{x}{\lambda_L}}$$



Für  $B(0) = B_a$ ,  $B(\infty) = 0$  ergibt sich für  $x > 0$ :

$$B(x) = B_a e^{-\frac{x}{\lambda_L}}$$

## 13.2 Flußquantisierung



Magnetfluß  $\Phi = AB = m\Phi_0$ ,  $\Phi_0 = \frac{\hbar}{2e} = 2,7 \cdot 10^{-15} V \cdot s \equiv [Wb]$   
Makroskopische Wellenfunktion

$$\Psi(\vec{r}) \sqrt{\frac{n_S}{2}} e^{i\Theta(\vec{r})}$$

Elektronen verhalten sich wie Bosonen-Teilchen

## 13.3 Theorie der Supraleitung

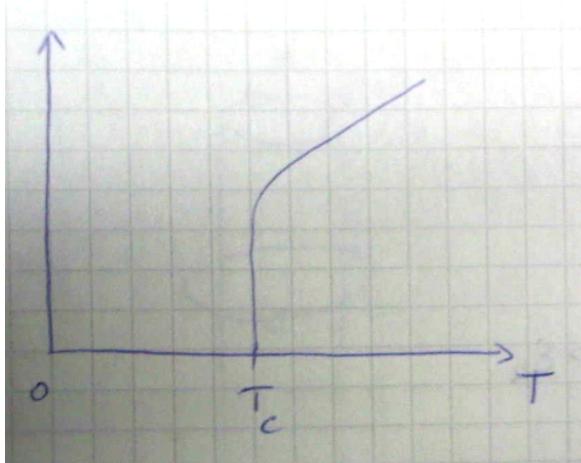
- 1) 'makroskopische' Theorie GL = Ginszburg-Landau (1956)

2) mikroskopische Theorie → BSC=Bardeen -Cooper-Schrieffer (1957)

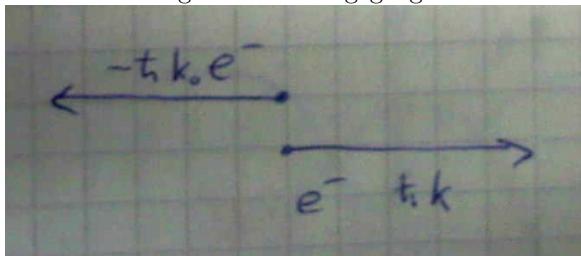
Messung des Isotopeneffekt

$$T_C \cdot \sqrt{M} = \text{const}$$

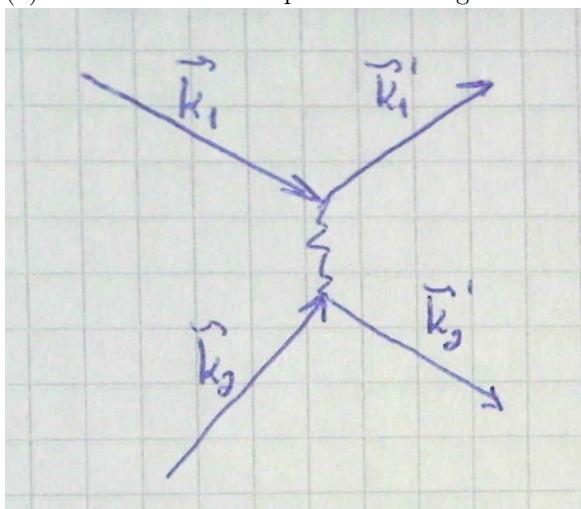
mit M Masse der Atome und ist proportional zu  $T_C \propto \omega_D$  der Debye-Frequenz.



Wechselwirkung von zwei entgegengesetzten Teilchen, den sogenannten Cooper Paaren:



(1) 'Kielwasser' → eine positive Ladungswolke → anziehen (2)

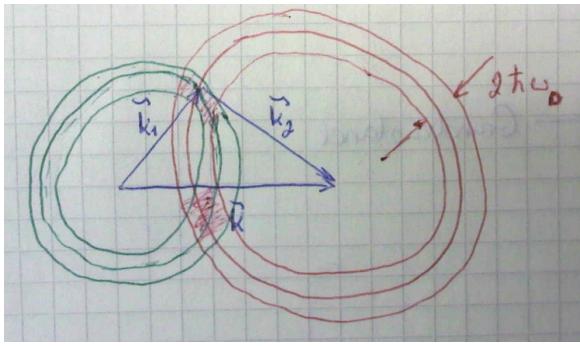


Die Elektronen  $\vec{k}_1$  und  $\vec{k}_2$  tauschen virtuelle phononen ( $\vec{q}$ ) aus

$$\vec{k}'_1 = \vec{k}_1 - \vec{q}; \quad \vec{k}'_2 = \vec{k}_2 - \vec{q}; \quad \vec{k}_1 + \vec{k}_2 = \vec{k}'_1 + \vec{k}'_2$$

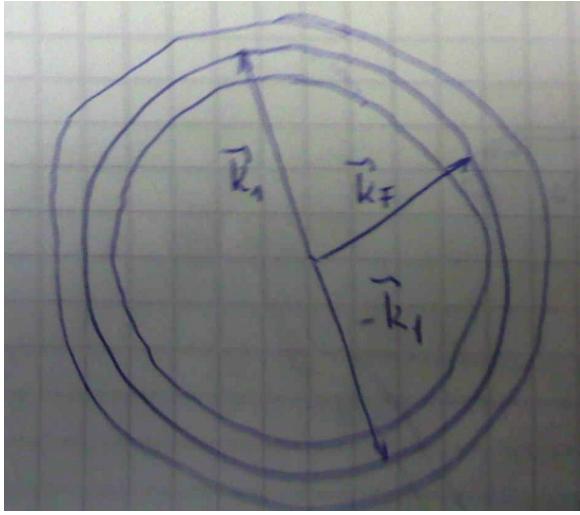
Die Elektronen WW wird durch ein Matrixelement beschrieben:

$$V_{kk'} = \begin{cases} -V, & |E_k - E_F| \leq \hbar\omega_D \text{ und } |E'_k - E_F| \leq \hbar\omega_D \\ 0, & \text{falls nicht der Fall} \end{cases}$$



$$\vec{k}_1 + \vec{k}_2 = \vec{K}$$

Im  $\vec{k}$ -Raum  $\rightarrow$  eine Kugelschale mit der Dicke  $\frac{\Delta k}{k_F} \approx \frac{2\hbar\omega_D}{E_F}$ . Phononenauustausch mit größtmöglicher Wahrscheinlichkeit für  $\vec{K} = 0$ . Entstehung der Cooper-Paare.



Zweiteilchen- Wellenfunktion

$$\Psi = A e^{i\vec{k}_1 \vec{r}_1} \cdot e^{i\vec{k}_2 \vec{r}_2}$$

mit  $\vec{k}_1 = \vec{k} = -\vec{k}_2$  und  $\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$

$$\Psi = \sum_k A_k e^{i\vec{k}\vec{r}}$$

BCS- Grundzustand:

$$E_{\Sigma} = \underbrace{\sum_{\text{kinetische Energie}} 2\epsilon_k v_k^2}_{+ \sum_{\text{Streuung } \rightarrow (k', -k')} V_{kk'} v_k u_k v_{k'} u_{k'}}$$

$$\text{mit } \epsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}, \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} = E_F$$

$v_k^2$  = die Wahrscheinlichkeit dass der Zustand  $(\vec{k}, -\vec{k})$  besetzt ist

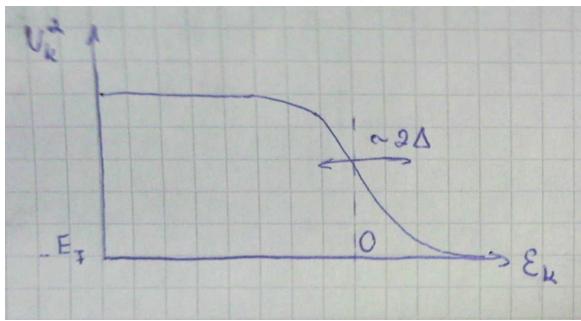
$u_k^2$  = die Wahrscheinlichkeit dass der Zustand  $(\vec{k}, -\vec{k})$  nicht besetzt (leer) ist

minimiere die Gesamtenergie  $E_{\Sigma}$

$$v_k^2 = \frac{1}{2} \left( 1 - \frac{\epsilon_k}{\sqrt{\epsilon_k^2 + \Delta^2}} \right)$$

Energielücke  $\Delta|_{T=0} \approx 1,76 k_B T_C$

$$\Delta = V \sum_k v_k u_k$$



Kondensationsenergie

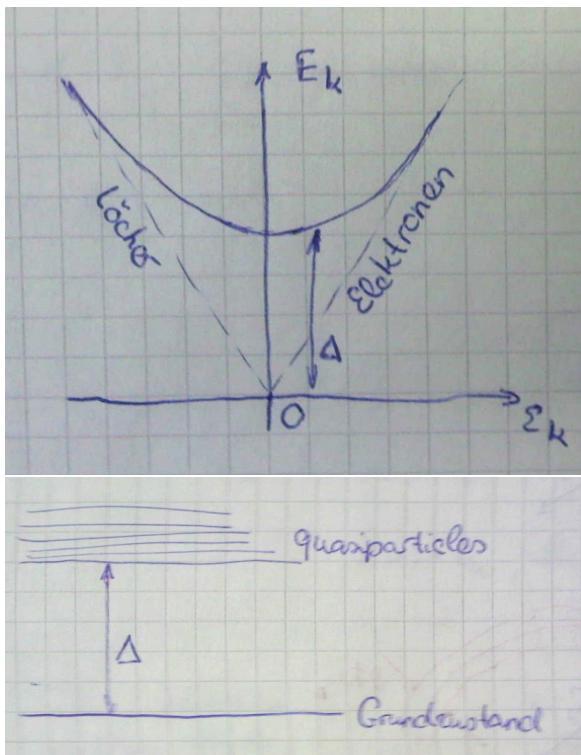
$$W = -\frac{1}{2}D(E_F)\Delta^2$$

Quasiteilchen = ungepaarte Elektronen und Löcher. Energie:

$$E_k = \sqrt{\epsilon_k^2 + \Delta^2}$$

für Normalleiter:

$$E_k = \epsilon_k = \frac{\hbar k^2}{2m}$$



Kohärenzlänge:

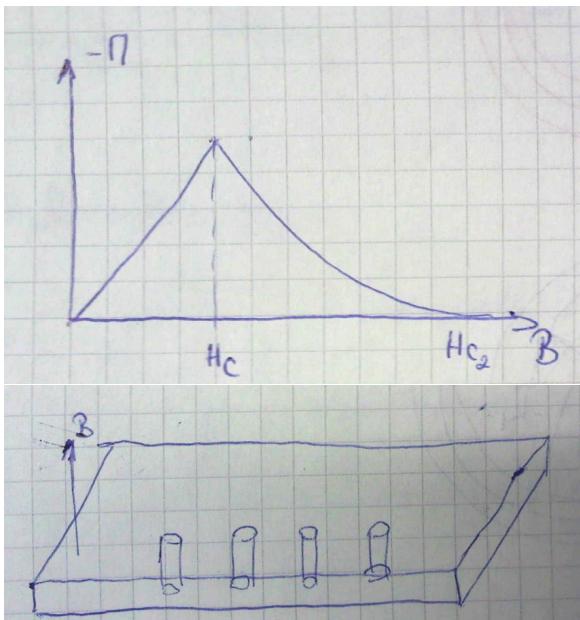
$$\xi_0 \approx \Delta x \approx \frac{\hbar}{p} \approx \frac{1}{\Delta k}$$

$$\Delta k \approx \frac{2\Delta \cdot k_F}{E_F} \approx \frac{2\Delta \cdot 2m}{\hbar^2 k_F} = \frac{4\Delta}{\hbar^2 v_F}$$

$$\xi_0 \approx 10 \text{ bis } 100 \text{ nm}$$

### 13.3 Supraleiter 2. Art

→ Flusschläuche = Flusswirbel = Vortices



$\lambda_L \gg \xi_0 \rightarrow$  Supraleiter 2.Art

$\lambda_L < \xi_0 \rightarrow$  Supraleiter 1.Art

Theoretische Arbeit von Abrikosov vorschlagt dass die Vortices eine quadratische Struktur annehmen. Experiment von Essmann + Träuble (1967) ergab eine Hexagonale ('ähnlich' quadratisch) Struktur.

