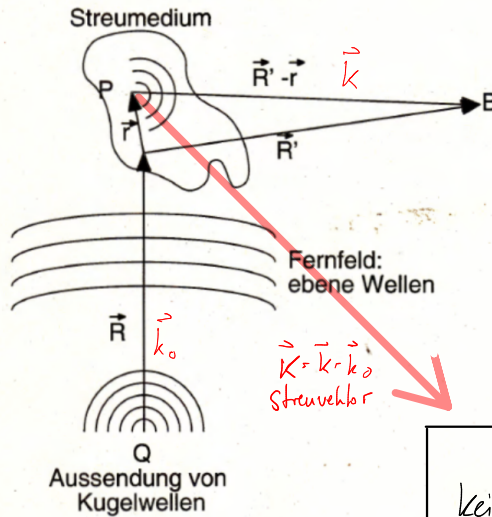


# Strahlung

TEILCHENART	ENERGIE
Elektronen	10 eV - 1 keV
Neutronen, leichte Atome	10 meV - 1 eV
Photonen	1 keV - 100 keV

1. kinematische Näherung gilt für Neutronen, Röntgenstrahlung und evtl. hochenergetische Elektronen

# Streuung



$$I(\vec{k}) = \left| \int d\vec{r} \rho(\vec{r}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \right|^2$$

Je kleiner die Struktur desto grösser  $k$ .

# Reziproke Gitter

$$\rho(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} S_{\vec{G}} e^{i\vec{G}\cdot\vec{r}}$$

$$\vec{r} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3$$

$$\vec{G} = h \vec{g}_1 + k \vec{g}_2 + l \vec{g}_3$$

$$g_i a_j = 2\pi \delta_{ij}$$

$$g_i = 2\pi \frac{a_j \times a_k}{a_i \cdot (a_j \times a_k)}$$

$$\vec{g}_1 = 2\pi \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{|\vec{a}_1 \times \vec{a}_2|}$$

$$\vec{g}_2 = 2\pi \frac{\vec{a}_3 \times \vec{a}_1}{|\vec{a}_1 \times \vec{a}_2|}$$

$$n = \frac{\vec{a}_1 \times \vec{a}_2}{|\vec{a}_1 \times \vec{a}_2|}$$

# Laue Beziehung

$$\vec{G} = \vec{k} \text{ oder } \vec{k}_0 \cdot \vec{k} = \frac{|\vec{G}|^2}{2}$$

$$I(\vec{k}=\vec{G}) \propto \frac{|A_0|^2}{R^2} |S_{\vec{G}}|^2 V^2$$

$$k = 2k \sin \theta$$

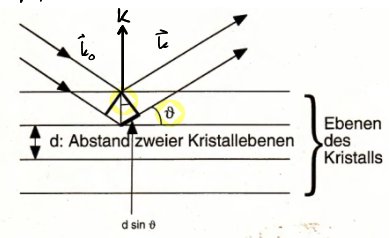
$$\# \text{ Interferenzpunkte} = \frac{V_{ew}}{V_{EZ}} = \frac{4/3 \pi k^3}{b^3}$$

# Friedelsche Regel

Keine Absorption  $\Rightarrow S_{hkl} = S_{h\bar{k}l}^*$   
 $\Rightarrow I_{hkl} = I_{h\bar{k}l}$   
 Zeigt Invertionssymmetrie, obwohl Kristall keine hat.

# Bragg-Beziehung

$$m\lambda = 2d \sin \theta$$



$$\sin^2 \theta = \left( \frac{\lambda}{2d} \right)^2 (h^2 + k^2 + l^2)$$

# Streuformel

$$S_{hkl} = \frac{1}{V_c} \int \rho(\vec{r}) e^{i\vec{G}\cdot\vec{r}} d\vec{r}$$

$$S_{hkl} = \frac{1}{V_c} \sum_{\vec{r}} e^{i\vec{G}\cdot\vec{r}} \int \rho_{\alpha}(\vec{r}') e^{i\vec{G}\cdot\vec{r}'} d\vec{r}'$$

$$f_{\alpha} = 4\pi \int \rho_{\alpha}(\vec{r}') r'^2 \frac{\sin(4\pi r' \sin \theta / \lambda)}{4\pi r' \sin(\theta / \lambda)} dr'$$

$$\stackrel{(\theta=0)}{=} 4\pi \int \rho_{\alpha}(r') r'^2 dr'$$

# Miller Indizes

$$m, n, o \rightsquigarrow h', k', l' = \frac{1}{m}, \frac{1}{n}, \frac{1}{o} \text{ (Erweitern)}$$

Vektor (hkl) steht senkrecht auf Ebene

$$\text{Abstand Gitterebene} = \frac{2\pi}{|\vec{G}_{hkl}|}$$

# Brillouin Zone

Kleinstes Polygon mit Ursprung als Zentrum und Mittelpunkten der reziproken Gitter als Grenze.

$$\text{Periodizität: } \frac{\pi}{a} \sim 3 \text{ \AA}^{-1} \sim 100 \text{ meV}$$

# Strukturfaktor

$$S_{hkl} = \sum_{\alpha} f_{\alpha} e^{i\vec{G}_{hkl} \cdot \vec{r}_{\alpha}}$$

$$= \sum_{\alpha} f_{\alpha} e^{-2\pi i (h u_{\alpha} + k v_{\alpha} + l w_{\alpha})}$$

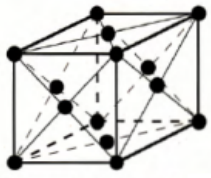
primitive Gitter:  $S = f$

$$S(hkl)_{sc} = 1$$

$$S(hkl)_{bcc} = \begin{cases} 0, & h+k+l \text{ ungerade} \\ 2f, & h+k+l \text{ gerade} \end{cases}$$

$$S(hkl)_{fcc} = \begin{cases} f, & h, k, l \text{ alle gerade oder alle ungerade} \\ 0, & \text{sonst} \end{cases}$$

# FCC



Koordinationszahl 12

$$\frac{a}{\sqrt{2}} \text{ Abstand}$$

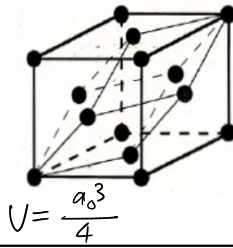
A-B-C-A-B-C

$O_h$  (4 Raumdiagonalen mit 3 Rotation)

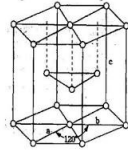
Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt, Al

Hohe Schmelzpunkt, relativ weich

# in EZ = 4



# HEXAGONAL CLOSE PACKED



Basic unit cell is hexagonal prism  
 Three atoms in the form of triangle midway between the two basal planes. When 6 equilateral triangles considered, 3 atoms on alternate triangles  
 Total 17 atoms  
 12 corner atoms  $\times \frac{1}{6}$  = 2 atoms  
 2 face atoms  $\times \frac{1}{2}$  = 1 atom  
 3 centre atoms = 3 atoms  
 Number of atoms per unit cell = 6 atoms

# HCP kein Bravais!

Koordinationszahl 12,  $\frac{a}{\sqrt{2}}$

A-B-A-B,  $D_{3h}$

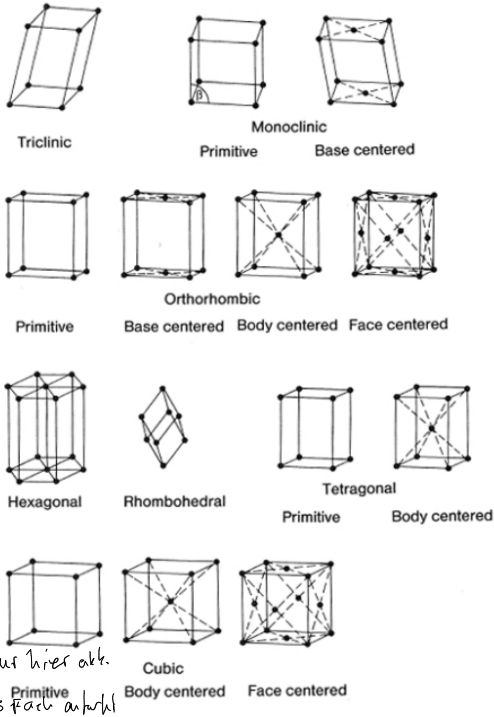
Zn, Cd, Be, Mg, Re, Ru, Os

3 unit cells consists of

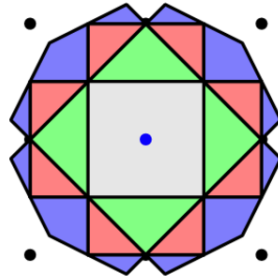
3 primitive cells which

have 2 atoms

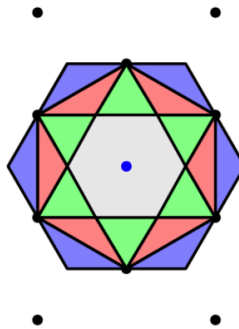
$\Rightarrow$  total = 6



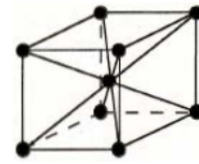
# Square



# Hexagonal



# BCC



Koordinationszahl: 8  
 Alkali Metalle

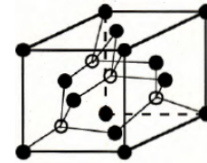
$$\vec{r} = u_x a_1 + v_x a_2 + w_x a_3$$

$$\vec{r}_1 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \vec{r}_2 = \begin{pmatrix} 1/2 \\ 1/2 \\ 1/2 \end{pmatrix}, S_{Hkl} = \sum_{\alpha} f_{\alpha} e^{-2\pi i (h u_{\alpha} + k v_{\alpha} + l w_{\alpha})}$$

$$a_{next} = \frac{\sqrt{3}}{2} a$$

# in EZ = 2

# Diamant-Struktur



Koordinationszahl: 4

fcc mit 2-Atom basis

fcc um ein Viertel Raumdiag. versch.

Diamant, Si, Ge

# Zink-Blende

ABC-ABC

III und V- Hauptgruppe

Diamant, mit verschiedenen Atomen in fcc.

GaAs, ZnS

# Wurzit

Gleich wie Zink-Blende aber: ABAB in (111) Richtung

# Ionische Struktur

## CsCl

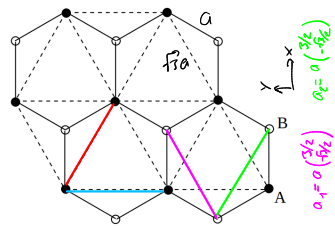
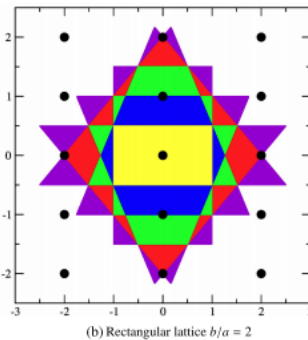
bcc mit Ion im Zentrum

Koordinationszahl 8

## NaCl

2 fcc ineinander

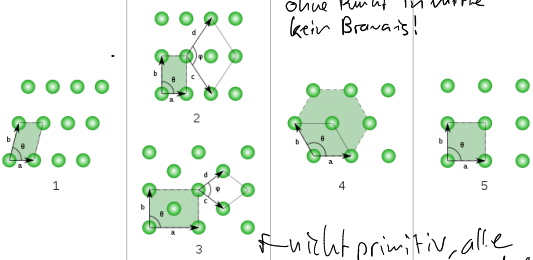
Koordinationszahl 6



Reziprok wieder hexagonal

$$a_1 = \sqrt{3}a \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, a_2 = a \begin{pmatrix} \sqrt{3}/2 \\ 3/2 \end{pmatrix}$$

ohne Punkt in mitte kein Bravais!



nicht primitiv, alle anderen schon

$|a| = |b|, \theta = 90^\circ$     $|a| \neq |b|, \theta = 90^\circ$     $|a| = |b|, \theta = 120^\circ$     $|a| = |b|, \theta = 90^\circ$

## Kovalente Bindung

$$E_{\pm} \approx \frac{H_{AA} \pm H_{AB}}{1 \pm S(R)}$$

## Richtung

Kovalent: Ja  
 Ionisch: Ja  
 Metallisch: Nein

## Ionische Bindung

$$\varphi_{ij} = \pm \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}} + \frac{\beta}{r_{ij}^n}$$

$$\varphi = N \left( - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \sum_{i \neq j} \frac{\pm 1}{r_{ij}} + \frac{\beta}{r^n} \sum_{i \neq j} \frac{1}{r_{ij}^n} \right)$$

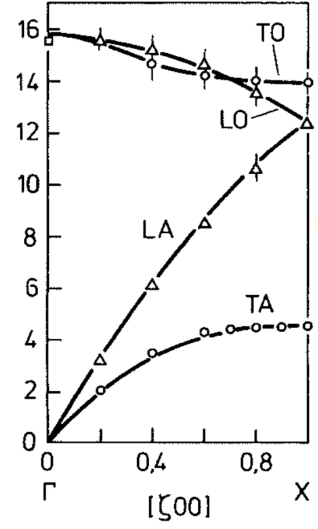
A (Modellierung Konstante)

Elektronen negativität:  $X = 0,184(I + A)$   
 I: Ionisierungsenergie, A: Elektronenaffinität  
 "neutral - e<sup>-</sup>" "neutral + e<sup>-</sup>"

## Van der Waals

$$\varphi \sim \frac{1}{r^6}$$

Atom	Bindungsenergie pro Atom (eV)	kJ/mol
NaCl	7.95	864
NaI	7.10	683
KBr	6.92	663



opt  $\Leftrightarrow \omega(q=0) \neq 0$

$$\Phi(r_{nai} + S_{nai}) = \Phi(r_{nai}) + \frac{1}{2} \sum_{nai, m\beta j} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial r_{nai} \partial r_{m\beta j}} S_{nai} S_{m\beta j}$$

## Phonon dispersion

$\int_0^{2\pi} du = 0$  wegen GGW  $\frac{qa}{2} = \pi$  (Periodizität)

$$\omega^2 = f \left( \frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right) \pm f \sqrt{\left( \frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right)^2 - \frac{4}{M_1 M_2} \sin^2 \left( \frac{qa}{2} \right)}$$

$M_1 = M_2 \Rightarrow \omega = 2\sqrt{\frac{f}{m}} \sin \frac{qa}{2}$ ,  $v_g = \frac{d\omega}{dq}$ ,  $\Delta E = \hbar \sqrt{2f} \left( \frac{1}{\sqrt{M_2}} - \frac{1}{\sqrt{M_1}} \right)$   
 hier  $a = \frac{a}{2}$  für 2 Atome in EZ

1 atom in EZ  $\rightarrow$  3 akk.  
 für jedes weitere atom  $\rightarrow$  + 3 opt.

$$M_1 \ddot{S}_{n,1} + f(2S_{n,1} - S_{n,2} - S_{n-1,2}) = 0$$

$$\left( \frac{2f}{M_1} - \omega^2 \right) u_1 - f \frac{1}{\sqrt{M_1 M_2}} (1 + e^{-iqa}) u_2 = 0$$

$$\begin{pmatrix} \frac{2f}{M_1} - \omega^2 & -\frac{f}{\sqrt{M_1 M_2}} (1 + e^{-iqa}) \\ -\frac{f}{\sqrt{M_1 M_2}} (1 + e^{iqa}) & \frac{2f}{M_2} - \omega^2 \end{pmatrix} = D_{\alpha i}^{\beta j}(q)$$

## Zustandsdichte

$$Z(\omega) d\omega = \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{\omega \text{ klein}}^{\omega \text{ groß}} dq = \frac{V}{(2\pi)^3} d\omega \int \frac{d\omega}{|\text{grad}_q \omega|}$$

## Debye

Bsp. mit  $|\text{grad}_q \omega| = c_{T,L}$  folgt  $Z(\omega) d\omega = \frac{V}{2\pi^2} \left( \frac{1}{c_L^3} + \frac{2}{c_T^3} \right) \omega^2 d\omega$

## Innere Energie

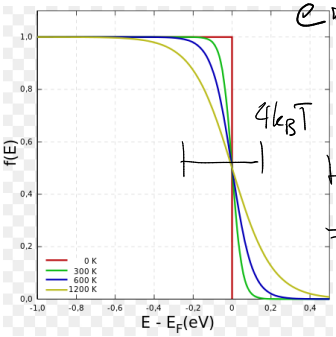
$$U = \frac{1}{V} \int_0^{\infty} Z(\omega) E(\omega, T) d\omega$$

## Spezifische Wärme

$$C_V = \left. \frac{\partial U}{\partial T} \right|_V \approx C_P$$

## Fermi

$$f(E, T) = \frac{1}{e^{\frac{E - E_F}{k_B T}} + 1}$$



Halbleiter:  $E > E_F$   
 $\Rightarrow$  Boltzmann

## Mathe

$$\log n! \sim n \log n - n$$

## Streuung

$$K \pm q = G = k - k_0 \pm q$$

$$\hbar \omega - \hbar \omega_0 \pm \hbar \omega(q) = 0$$

$$\hbar \vec{k} - \hbar \vec{k}_0 \pm \hbar \vec{G} = 0$$

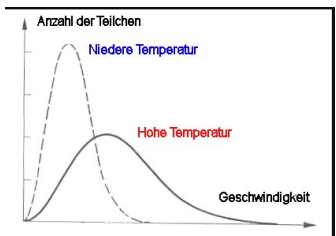
## Spektroskopie (Phonon)

- Raman  $\rightarrow$   $> 400 \text{ nm}$  sichtbar
- $\Rightarrow q \approx 0$  auflösbar
- Hochauflösende Röntgenspektroskopie  $q > 0$
- Thermische Neutronen,  $k_B T \sim 25 \text{ meV}$  ( $T = 300 \text{ K}$ )

## Boltzmann

$$P_n = a e^{-E_n / k_B T}$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} P_n = 1 \Rightarrow a$$



Bsp. Harm. osz.  $P_n = e^{-n\hbar\omega/k_B T} (1 - e^{-\hbar\omega/k_B T})$

## Mittlere Energie

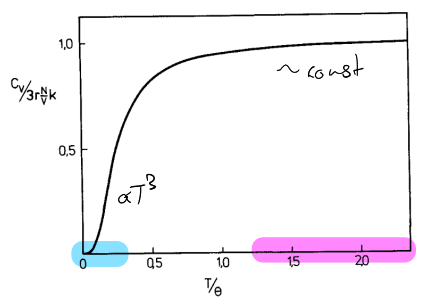
$$E(\omega, T) = \sum_{n=0}^{\infty} E_n P_n$$

**Elastisches isotropes Medium**

**Debye-Modell**

$w = cq$   
 $Z(\omega) d\omega = \frac{V}{2\pi^2} \left( \frac{1}{c^3} + \frac{2}{c_T^3} \right) \omega^2 d\omega$

$C_V = \frac{1}{V} 3r N k_B \left| (k_B T > \hbar \omega_D) \right.$   
 $C_V(T) = \frac{1}{V} 3r N k_B \frac{4\pi^2}{5} \left( \frac{T}{\Theta} \right)^3 \left| \left( \frac{\Theta}{T} > 1 \right) \right.$



**Debye Frequenz**

$\int_0^{\omega_D} Z(\omega) d\omega = 3rN$

**Debye Temperatur**

$k_B \Theta_D = \hbar \omega_D$

**Abschätzungen**

$k_D = \frac{2\pi}{a}$   
 $E = \hbar \omega_D$   
 $\omega_D = k_D \cdot v_{schall}$

**Bohr radius**

$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m e^2}$

**Thermische Energie**

**Oszillator**

$E_n = (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega$ ,  $\langle n \rangle_T = \frac{1}{e^{\hbar \omega / k_B T} - 1}$

$Z(\omega) = 3N \delta(\omega - \omega_E)$  z.d.

$E(\omega, T) = \hbar \omega (n + \langle n \rangle_T) = \sum_{n=0}^{\infty} E_n P_n$

Energie einer Kristallwelle mit Frequenz  $\omega$

$P_n = a e^{-E_n / k_B T} = e^{-\hbar \omega / k_B T} (1 - e^{-\hbar \omega / k_B T})$

**Teilchendichte**

$n = \int_0^{E_F} f(T, E) D(E) dE$

**Freies Elektronengas**

$D(E) = \frac{(2m)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} \sqrt{E}$   
 $D(E_F) = \frac{3}{2} \frac{n}{E_F}$ ,  $E_F = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n)^{2/3}$   
 $D(E_F) = \frac{1}{2\pi^2} \frac{2m}{\hbar^2} (3\pi^2 n)^{1/3}$

$\vec{v}_n(\vec{k}) = \frac{1}{\hbar} \vec{\nabla}_k E_n(\vec{k})$   
 $U = \frac{3}{5} n E_F^0$

Metal	$n$ $10^{22} \text{ cm}^{-3}$	$r_s$	$k_F$ $10^8 \text{ cm}^{-1}$	$N_F$ $10^8 \text{ cm}^{-3} / s$	$E_F^0$ eV	$T_F$ $10^4 \text{ K}$
Li	4.62	3.27	1.11	1.29	4.70	5.45
Al	18.07	2.07	1.75	2.03	11.65	13.52
Cu	8.47	2.67	1.36	1.57	7.03	8.16
Au	5.90	3.01	1.20	1.39	5.52	6.41

**Wärmekapazität freies e Gas**

$C_V \approx \frac{\pi^2}{3} D(E_F) k_B^2 T$ , ( $e^-$  Gas,  $D(E)$ )  
 $C_V = \frac{\pi^2}{2} n k_B \frac{T}{T_F}$  ( $e^-$  Gas, exakt)  
 Metalle:  $T \ll T_F$ ,  $D(E) = D(E_F) \sqrt{\frac{E}{E_F}}$

**Volumen EZ in  $\vec{k}$**

1D:  $\frac{2\pi}{L}$   
 2D:  $\left(\frac{2\pi}{L}\right)^2$   
 3D:  $\frac{2\pi}{L}$

**Bindungsenergie**

$\frac{E(r)}{N}$  | Halbleiter:  
 $E_g \sim E_{bind}$

**Abschätzung Elektron**

$k_F = (3\pi^2 n)^{1/3}$   
 $E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}$ ,  $n = \frac{\#EZ}{a^3}$

**Fermi Temperatur**

$k_B T_F = E_F^0$

**Einstein Temperatur**

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

**Zustandsdichte D**

$D(E) = \frac{1}{\text{Vol. EZ}} \frac{dN(E)}{dE} \stackrel{?}{=} \frac{dn}{dE}$   
 $D(E) = 2 \delta(E - E_0)$  (0-D)  
 $D(E) = \frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} \frac{1}{\sqrt{E}}$  (1-D)  
 $D(E) = \frac{m}{\pi \hbar^2}$  (2-D)  
 $D(E) = \frac{(2m)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} \sqrt{E}$  (3-D)

**Fermi Statistik**

$\mu = E_i + k_B T \log \frac{n_i}{g_i - n_i}$   
 $n_i = g_i \frac{e^{-\frac{E_i - \mu}{k_B T}}}{e^{-\frac{E_i - \mu}{k_B T}} + 1}$

$f(E, T) = \frac{1}{e^{\frac{E_i - \mu}{k_B T}} + 1}$  (Metalle)

**Wellenvektor berechnen**

$N = 2 \sum_{\vec{k}} 1$   
 $k_F = \frac{\pi}{2} n$  (1-dim)  
 $k_F = \sqrt{2\pi n}$  (2-dim)  
 $k_F = (3\pi^2 n)^{1/3}$  (3-dim)

$N = \frac{\text{Brillouin Zone Fläche}}{\text{Volumen Einheitszelle in } g\text{-space}}$   
 $n = \frac{N}{\text{Vol in } g\text{-space}}$  Spin?

# Block-Wellen

$$\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E\right) C_{\vec{k}} + \sum_{\vec{G}} V_{\vec{G}} C_{\vec{k}-\vec{G}} = 0$$

$$\psi_{nk}(\vec{r}) = u_{nk}(\vec{r}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$$

$$u_{\vec{k}}(\vec{r}) = u_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{r}_n)$$

$$\psi_{\vec{k}+\vec{G}}(\vec{r}) = \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \Rightarrow E(\vec{k}) = E(\vec{k} + \vec{G})$$

$$\vec{v} = \vec{\nabla}_{\vec{k}} \omega(\vec{k}) = \frac{1}{\hbar} \vec{\nabla}_{\vec{k}} E(\vec{k})$$

# Valley Elastizität

Elastische Zustände in versch. kristall Richt.

Bsp. Si: (100), (100), ..., (001)  $\Rightarrow g_v = 6$

GaAs:  $g_v = 1$ , Graphen:  $g_v = 2$

Ge: (111)  $\rightsquigarrow 8$ , aber ist am Rand  $\rightsquigarrow g_v = 4$

# Mott (elektrostatische Abschirmung)

$E_F = \text{const}$ , trotz Punktdefekten

$$(\Gamma_{TF})^{-1} = \sqrt{\frac{e^2 D(E_F)}{\epsilon_0}} \quad (\text{Thomas-Fermi-Abschirmlänge})$$

$$\Gamma_{TF} \sim \frac{1}{2} \left(\frac{n}{g_0^3}\right)^{-1/6}, \text{ Falls } n^{-1/3} \gg \lambda_{a_0} \Rightarrow \text{kein Metall mehr}$$

# $\delta$ potential

$$H = \frac{p^2}{2m} + v_0 \delta(x)$$

$$\psi_0 = \sqrt{\kappa} e^{-\kappa|x|}$$

$$E = -\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m}$$

$$E_0 = -\frac{mv_0^2}{2\hbar^2} \quad (\text{geb. Zustand})$$

# Schrödinger Gleichung in k-Raum

$$\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E\right) C_{\vec{k}} + \sum_{\vec{G}} V_{\vec{G}} C_{\vec{k}-\vec{G}} = 0$$

# Maxwell

$$\text{div } \vec{E} = \frac{\rho}{\epsilon_0}, \text{ div } \vec{B} = 0, \text{ rot } \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}$$

$$\text{rot } \vec{B} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} + \mu_0 \vec{j}$$

# Energieleiter

$$\Delta E = 2 |V_{\vec{G}}|$$

$\vec{G}$ -te Fourierkomponente des Potentials

# Debye-Waller-Faktor

$$I = D(T) I_0, \quad D(T) = e^{-\frac{1}{3} |\vec{G}|^2 \overline{u^2(T)}}$$

$u \rightsquigarrow$  Amplitude der Phononen

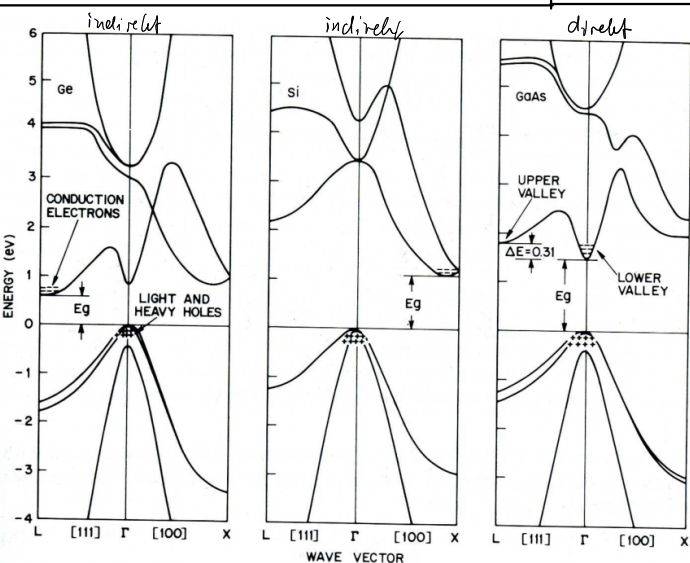
$$\overline{u^2} = \left\langle \sum_j \delta_j e^{i\vec{G}\cdot\vec{r}_j} \right\rangle^2 e^{-\frac{1}{6} |\vec{G}|^2 \overline{u^2}}$$

# Hochrelativistische Limit

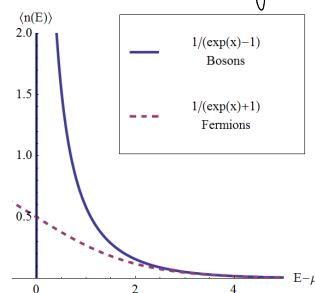
$$E_F^2 = (\hbar c k_F)^2 + m^2 c^4 \approx (\hbar c k_F)^2$$

# Konstanten

$$g \approx Z, \quad M_B = \frac{e\hbar}{2m}$$



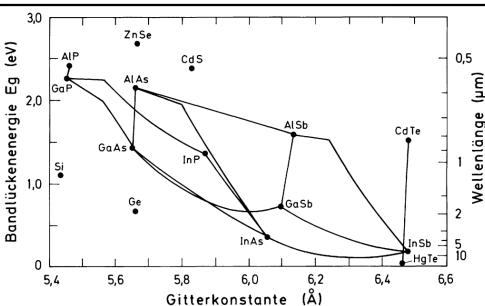
# Bose-Einstein Verteilung



$$\langle n(E) \rangle = \frac{1}{e^{\beta(E-\mu)} - 1} \quad (\text{Bose-Einstein})$$

# Grösse 2. unterste Bandlücke

Die parabolische Dispersion des freien Elektronengases geht im quasi-freien Elektronengas von allen Punkten des reziproken Gitters aus. Somit entsteht die zweitunterste Bandlücke am Schnittpunkt mit der um zwei reziproke Gittervektoren verschobenen Parabel. Die zweitunterste Bandlücke ist somit durch die zweite Fourierkomponente bestimmt (vgl. Herleitung des Bloch-Theorems in der Vorlesung).



## Drude Modell

$$m\dot{v} + \frac{m}{\tau} v_D = -eE \quad \leftarrow v = v_{therm.}$$

$$\vec{v}_D = -\frac{e\tau}{m} |\vec{E}| \quad (\text{stationär, } \dot{v}=0)$$

$$\Rightarrow \vec{j} = en\vec{v}_D = -ne\tau \vec{E} = -\frac{e^2 \tau n}{m} \vec{E}$$

$$\Rightarrow \mu = \frac{d\vec{v}}{d\vec{E}} = \frac{e}{m} \tau \quad (\text{mobilität})$$

$$\sigma = \frac{|\vec{j}|}{|\vec{E}|} = \frac{e^2 \tau n}{m}, \quad \tau \rightarrow \infty$$

• all electrons contribute to the current (forbidden by Pauli)

•  $\tau$  describes the average time between two scattering events at the core of the solid. In contradiction with Bloch Theorem

$$\hbar \vec{k} = -e\vec{E} \quad \text{aus Korrespondenzprinzip}$$

## Effektive Masse

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

$$m^* \overset{\text{isotrop}}{=} \frac{\hbar^2}{d^2 E / dk^2}$$

breit  $\rightarrow m^*$  gross

Ideal Fall Leitungsband Metall

$$m^* = \text{const}, k_F \ll E_F,$$

$$\sigma = \frac{e^2 \tau (E_F) n}{m^*}$$

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

## Hall

$$S(B) = \frac{E_{Druck}}{j} = \frac{m}{\tau n e^2}$$

$$R_H = \frac{E_y}{j \times B} = -\frac{1}{ne}$$

## Satz von Green periodische Flukt

$u(\vec{r}), v(\vec{r})$  Periodizität Bravais Gitter

$$\int_C d\vec{r} u \nabla v = - \int_C d\vec{r} v \nabla u$$

$$\int_C d\vec{r} u \nabla^2 v = \int_C d\vec{r} v \nabla^2 u$$

## Parabolische Näherung

In der Nähe des Bandmaximums gilt

$$E(\vec{k}) = E_0 - \frac{\hbar^2 k^2}{2|m_1^*|}, \quad m_1^* \geq 0$$

$\rightarrow \vec{v} = +\frac{e}{|m_1^*|} \vec{E}$   
effektive masse an Oberkante für Löcher positiv

## Theorie Widerstand

I:  $e^-e^-$  WW vernachlässigt

a) keine perfekte Periodizität

b) Phononen (inelastisch, E-Erh. gilt)

II:  $e^-e^-$  WW.

## Stromdichte

$$\vec{j} = -\frac{e}{8\pi^3} \int \vec{v}(\vec{k}) \cdot f(\vec{k}) d\vec{k}$$

z.B.

## Leitfähigkeit Metall

$$\sigma = \frac{e^2}{8\pi^3 \hbar} \int_{E=E_F} dS_E \frac{v_x}{v(\vec{k})} \tau(\vec{k})$$

Freie Elektronen =  $\frac{1}{3} n v(E_F) \tau(E_F)$

$$\sigma = \frac{e^2 \tau(E_F) n}{m^*}$$

$\mu = \frac{e}{m^*} \tau(E_F)$  QM: von Integrale im k-Raum Druck: alle nehmen teil

Material	Art	Energie in eV	
		0 K	300 K
<b>Elemente</b>			
C (als Diamant)	indirekt	5,4	5,46-5,6 <sup>[1]</sup>
Si	indirekt	1,17	1,12
Ge	indirekt	0,75	0,67
Se	direkt		1,74
<b>IV-IV-Verbindungen</b>			
SiC 3C	indirekt		2,36
SiC 4H	indirekt		3,28
SiC 6H	indirekt		3,03
<b>III-V-Verbindungen</b>			
InP	direkt	1,42	1,27
InAs	direkt	0,43	0,355
InSb	direkt	0,23	0,17
InN	direkt		0,7
In <sub>x</sub> Ga <sub>1-x</sub> N	direkt		0,7-3,37
GaN	direkt		3,37
GaP 3C	indirekt		2,26
GaSb	direkt	0,81	0,69
GaAs	direkt	1,52	1,42
Al <sub>x</sub> Ga <sub>1-x</sub> As	x < 0,4 direkt, x > 0,4 indirekt		1,42-2,16
AlAs	indirekt		2,16
AlSb	indirekt	1,65	1,58
AlN	direkt		6,2

## Boltzmann-Gleichung $f \rightarrow$ fermi funktion

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}} f - \frac{e}{\hbar} \vec{E} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{k}} f = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_S$$

$$f(\vec{k}) = f_0(\vec{k}) + \frac{e}{\hbar} \tau(\vec{k}) \vec{E} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{k}} f_0(\vec{k}) \quad (\text{linearisiert})$$

## Relaxationszeit - Modell

Streuung bringt ein System, das sich aussserhalb des GGW befindet zurück ins GGW.

$$f - f_0 = (f_{stat} - f_0) e^{-t/\tau} \quad \leftarrow \text{Relaxationszeit}$$

inelastische Streuung führt zum therm. GGW.

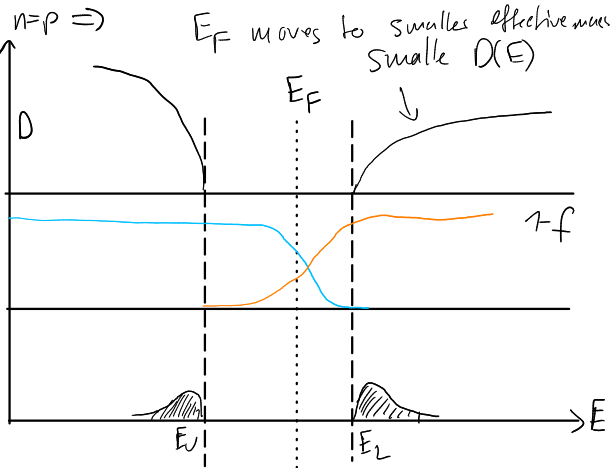
# Ladungsträgerdichte

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

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

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

es hat wenig Löcher



# Tiefe Temperaturen

Annahme: Hauptbeitrag von Donatoren  
 $k_B T \ll E_d$

$$n \approx \sqrt{N_D N_{eff}^L} e^{-E_d/2k_B T}$$

freie Elektronen im Leitungsband

$$p \approx \sqrt{N_A N_{eff}^V} e^{-E_A/2k_B T}$$

# Diffusionsspannung

$$n_n = N_{eff}^L e^{-\frac{E_C - E_F}{k_B T}}$$

$$p_p = N_{eff}^V e^{-\frac{E_F - E_V}{k_B T}}$$

$$eV_D = -(E_V^n - E_V^p) = k_B T \log \frac{p_p n_n}{n_i^2}$$

# Einstein Beziehung

$$D_N = \frac{k_B T}{e} \mu_N$$

Diffusion ~ Beweglichkeit

# Diffusionsstrom

$$V_D = V_n(\infty) - V_p(-\infty)$$

$$= \frac{e}{2 \epsilon \epsilon_0} (N_D d_n^2 + N_A d_p^2)$$

# Raumladungszone

$$d_n = \sqrt{\frac{2 \epsilon \epsilon_0 V_D}{e} \frac{N_A / N_D}{N_A + N_D}}$$

$$d_p = \sqrt{\frac{2 \epsilon \epsilon_0 V_D}{e} \frac{N_D / N_A}{N_A + N_D}}$$

$$\sim 10^2 - 10^1 \text{ nm}$$

$$E \sim 10^4 - 10^6 \frac{\text{V}}{\text{m}}$$

Falls  $N_A = N_D$

$$\Rightarrow d_n \propto \frac{1}{\sqrt{N}}$$

$$E_g \text{ const.} \sim |E| \cdot d_n \sim \frac{|E|}{\sqrt{N}}$$

$$d_n + d_p = \sqrt{\frac{2 \epsilon \epsilon_0 V_D}{e} \frac{N_A + N_D}{N_A N_D}}$$

# Ladungserhaltung

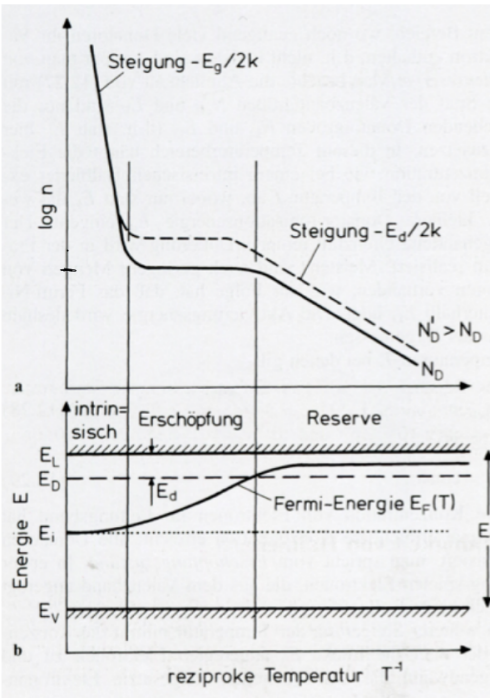
$$N_D d_n = N_A d_p$$

# Intrinsische Leitfähigkeit

$$n = p$$

# Massenwirkungsgesetz

$$n_i p_i = n_i^2 = N_{eff}^L N_{eff}^V e^{-E_g/k_B T}$$



$E_F$  ist die Energie die es braucht um ein Elektron ins Leitungsband zu geben. Konstanz kommt von, elektron & loch.

# Näherung der Nichtentartung

$$n = 2 \left( \frac{m_e^* k_B T}{2 \pi \hbar^2} \right)^{3/2} e^{-(E_C - E_F)/k_B T}$$

$$p = 2 \left( \frac{m_h^* k_B T}{2 \pi \hbar^2} \right)^{3/2} e^{-(E_V - E_F)/k_B T}$$

$$E_F = \frac{E_V + E_C}{2} + \frac{3}{4} k_B T \log \left( \frac{N_{eff}^V}{N_{eff}^L} \right)$$

# Elektrische Gleichrichtung in P-N Übergang

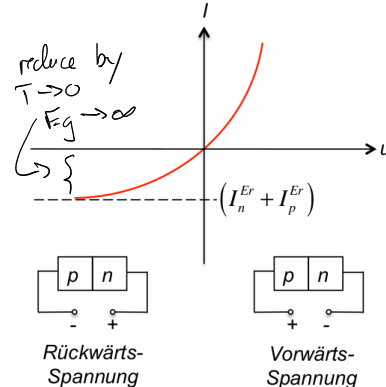
$$E_F(n) - E_F(p) = -eV$$

prob. for success:  $e^{-e(V_D - U)/k_B T}$  (Diffusion)

$$I_n^{rec} = I_n^{gen} \quad (\text{thermal equilibrium})$$

$$I_n^{rec} \propto e^{-e(V_D - U)/k_B T}$$

$$\Rightarrow I_{tot} = I_n^{rec} - I_n^{gen} = I_n^{gen} (e^{eU/k_B T} - 1)$$



# Donator radius

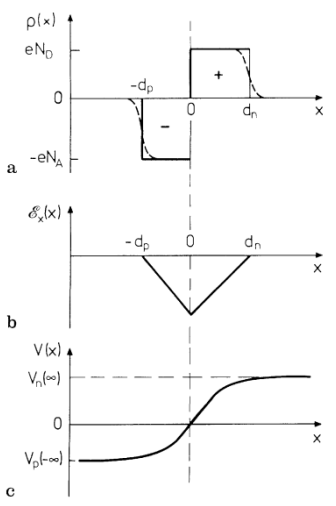
$$r_D = \epsilon_0 \epsilon \frac{\hbar^2}{\pi m_e e^2} \quad \text{Si} \sim 30 \text{ \AA}$$

Die Herleitung der effektiven Zustandsdichte erfolgt mit dem Ansatz für die Elektronendichte

$$n_e(T, \mu) = \int_{E_C}^{\infty} dE D_C(E) f(E, T, \mu) = N_C(T) e^{-\frac{E_C - \mu}{k_B T}}$$

Dabei ist die Zustandsdichte  $D_C(E)$  temperaturunabhängig. Die Temperaturabhängigkeit kommt von der Integration über die Fermifunktion. Je höher die Temperatur, desto tiefer im Band liegende Zustände

# Schottky-Modell



$$V = V_n(\infty) - \frac{eN_D}{2\epsilon\epsilon_0} (-d_n + x)^2$$

$$V = V_p(-\infty) + \frac{eN_A}{2\epsilon\epsilon_0} (d_p + x)^2$$

# Riesenwagnetwiderstand

$$R = \frac{L}{\sigma \cdot A}$$

$$R_{M(up)} = 2\sigma_p^{-1} \frac{L}{A}$$

$$R_{M(down)} = 2\sigma_a^{-1} \frac{L}{A}$$

$$R_M = \frac{2L/A}{\sigma_a + \sigma_p}$$

$$GMRR = \frac{R_{M(up)}}{R_M} - 1 = \frac{1}{4} \left( \frac{\sigma_a}{\sigma_p} + \frac{\sigma_p}{\sigma_a} - 2 \right)$$

# Wasserstoffmodell

$$E_{ion} = 13,6 \text{ eV} \cdot \frac{m_e}{m_0} \cdot \frac{1}{\epsilon^2} \quad (\text{ionisierungs } E.)$$

$$r = a_0 \epsilon \frac{m_0}{m_e}, \quad n \gg \frac{1}{\frac{4}{3}\pi r^3} \quad (\text{Überlapp signif.})$$

# Zyklotron

$$\omega_c = \frac{eB}{m^*}, \quad T = \frac{m^* \mu_p}{e}$$

Bedingung:  $\omega_c \gg \frac{1}{T}$

# Herleitung

$$n_c(T) = \int_{\epsilon_c}^{\infty} d\epsilon g_c(\epsilon) \frac{1}{e^{(\epsilon-\mu)/k_B T} + 1}$$

$$p_v(T) = \int_{-\infty}^{\epsilon_v} d\epsilon g_v(\epsilon) \left( 1 - \frac{1}{e^{(\epsilon-\mu)/k_B T} + 1} \right)$$

Falls  $\epsilon_c - \mu \gg k_B T$  und  $\mu - \epsilon_v \gg k_B T$  gilt  $\leadsto$  Boltzmann

$$\Rightarrow \begin{cases} n_c(T) = N_c(T) e^{-(\epsilon_c - \mu)/k_B T} \\ p_v(T) = P_v(T) e^{-(\mu - \epsilon_v)/k_B T} \end{cases}$$

Parabolische  $g_{c,v}(\epsilon) = \sqrt{2|z - \epsilon_c|} \frac{m_{c,v}^{*3/2}}{h^3 \pi^2}$

mit  $N_c(T) = \int_{\epsilon_c}^{\infty} d\epsilon g_c(\epsilon) e^{-(\epsilon - \epsilon_c)/k_B T} = \frac{1}{4} \left( \frac{2m_0 k_B T}{\pi h^2} \right)^{3/2} \left( \frac{m_c^*}{m_0} \right)^{3/2}$

$$P_v(T) = \int_{-\infty}^{\epsilon_v} d\epsilon g_v(\epsilon) e^{-(\epsilon_v - \epsilon)/k_B T} = \frac{1}{4} \left( \frac{2m_0 k_B T}{\pi h^2} \right)^{3/2} \left( \frac{m_v^*}{m_0} \right)^{3/2}$$

# Termindefinition

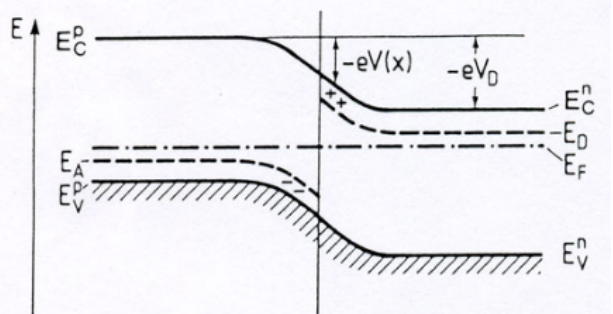
n: Donator, e<sup>-</sup> zu viel, N<sub>D</sub>, P, V-Gruppe  
 p: Akzeptor, e<sup>-</sup> fehlt, N<sub>A</sub>, B, III-Gruppe  
 N=verfügbar, N<sup>0</sup>=neutral, N<sup>+</sup>/N<sup>-</sup>=ionisiert

# Homogene Halbleiter

$$n + N_A^- = p + N_D^+$$

# Halbleiter Def

T=0 Isolator, bei Temp. untermalb  
 Schmelztemp. aber messbar leitfähig.  
 Eigenschaft,  $\sigma$  wird für höhere Temp. grösser.



Wir lösen die Poisson-Gleichung für das n-Gebiet; die Rechnung für das p-Gebiet verläuft analog. Wir nehmen an, dass für das elektrische Feld  $E_x(d_n) = 0$  und für das Potenzial  $V(d_n) = V_n(\infty)$  gilt.

$$\int_0^x dx \int_0^x dx' \frac{\partial^2 V(x)}{\partial x'^2} = - \int_0^x dx \int_0^x dx' \frac{eN_D}{\epsilon\epsilon_0}$$

$$- \int_0^x dx E_x(x) = \int_0^x dx \frac{\partial V(x)}{\partial x} = - \int_0^x dx \frac{eN_D}{\epsilon\epsilon_0} (-d_n + x)$$

$$V(x) = V_n(\infty) - \frac{eN_D}{2\epsilon\epsilon_0} (-d_n + x)^2$$

# Schottky Serie

Das Potenzial  $V(x)$  ist an der Stelle  $x = 0$  stetig. Wir definieren die sog. Diffusionsspannung  $V_D = V_n(\infty) - V_p(-\infty)$ . Für sie gilt

$$V_D = V_n(\infty) - V_p(-\infty) = \frac{e}{2\epsilon\epsilon_0} (N_D d_n^2 + N_A d_p^2)$$

Mit der Ladungserhaltung gilt  $N_D d_n = N_A d_p$ . Damit erhalten wir

$$d_n = \left( \frac{2\epsilon\epsilon_0 V_D}{e} \right)^{1/2} \sqrt{\frac{N_A/N_D}{N_A + N_D}}$$

$$d_p = \left( \frac{2\epsilon\epsilon_0 V_D}{e} \right)^{1/2} \sqrt{\frac{N_D/N_A}{N_A + N_D}}$$

# Einführung

$$\left( \frac{m^*}{m_0} \right)^{3/2} \leadsto \sum_i g_v \left( \frac{m_{ci}}{m_0} \right)^{3/2} = G \left( \frac{m_e}{m_0} \right)^{3/2}$$

Silizium ✓



## Dia/Paramagnetismus

$$\vec{B} = \mu_0 (\vec{H} + \vec{M}), \quad \vec{M} = \vec{m} \frac{N}{V}$$

$$\mu_0 \vec{M} = \chi \vec{B} = \chi \mu_0 \vec{H}$$

$\chi < 0 \Rightarrow$  diamagn.

$\chi > 0 \Rightarrow$  paramagn.

## Paramagnetismus

$$\vec{m} = -\frac{e}{2m} \sum_i \vec{r}_i \times \vec{p}_i = -\mu_B \vec{L}$$

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m}, \quad \vec{m} = \mu_B g_0 \sum_i \vec{s}_i$$

closed shells  $\Rightarrow L = S = 0$

$\hookrightarrow$  no paramagnetismus

## Diamagnetismus

$A_1, A_2, C_2$

induktion von Eddy Strömen. Entgegen dem angelegten Feld.

$$H_{kin} = \frac{1}{2m} \sum_i (\vec{p}_i + e\vec{A})^2$$

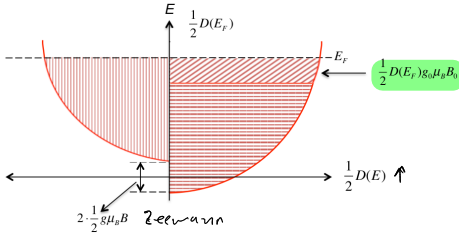
$$\vec{m} = -\frac{\partial}{\partial \vec{B}} \langle \phi | H | \phi \rangle$$

$$\vec{m} = \underbrace{-\mu_B \langle \phi | L_z | \phi \rangle}_{\text{Para}} - \underbrace{\frac{e^2}{4m} \langle \phi | \sum_i (x_i^2 + y_i^2) | \phi \rangle}_{\text{Dia}}$$

$\tau_{dep.}$

## Freie Elektronen (Metall)

para:



$$M = m \cdot \Delta n = \frac{1}{2} g \mu_B \cdot \Delta n$$

↑  
umbrichtl. Elektronen

$$M = \frac{1}{2} D(E_F) g_0 \mu_B B \frac{1}{2} g_0 \mu_B$$

$$\Rightarrow \chi_p = \mu_0 \frac{g_0^2}{4} \mu_B^2 D(E_F) \approx \mu_0 \mu_B^2 D(E_F)$$

dia:

no classical contribution.  $E_n = \hbar \omega_c (n + \frac{1}{2}), \omega_c = \frac{eB}{m^*}$

$$\chi_d \sim \mu_0 \mu_B^2 D(E_F) \frac{1}{3} \left( \frac{m}{m^*} \right)^2$$

dia:

$$\chi = -\frac{e^2 n}{6m} \mu_0 \sum \langle \phi | r_i^2 | \phi \rangle = -n \frac{\mu_0 z e^2}{6m} \langle r^2 \rangle$$

Langevin

## Austausch Wechselwirkung

$$-J = \frac{2CSZA}{1-s^2} = E_I - E_S$$

$J < 0 \Rightarrow$  singlet is groundstate

## Energie im Magnetfeld

$$E = -\vec{\mu} \cdot \vec{H} = -m_J g \mu_B B$$

## Magnetisierung berechnen

Boltzmann-Statistik:

$$N_{\pm 1/2} = C \exp(\pm g \mu_B B / 2k_B T)$$

Die Konstante C ist durch die Normierung festgelegt:

$$C [\exp(g \mu_B B / 2k_B T) + \exp(-g \mu_B B / 2k_B T)] = N$$

Es folgt für die Besetzung der beiden Zustände:

$$N_{\pm 1/2} = \frac{N \exp(\pm g \mu_B B / 2k_B T)}{2 \cosh(g \mu_B B / 2k_B T)}$$

Die totale Magnetisierung ist die Differenz der beiden Besetzungszahldichten gewichtet mit dem atomaren magnetischen Moment.

$$M = \frac{g \mu_B}{2} (n_{-1/2} - n_{1/2}) = \frac{n g \mu_B}{2} \tanh(g \mu_B B / 2k_B T)$$

**Paramagneten** sind Alkalimetalle (Lithium, Natrium, nicht aber Cäsium), Eisen, Nickel, Gadolinium, Dysprosium, Erbium jeweils oberhalb ihrer Curie Temperatur. Normalleitendes Aluminium ist paramagnetisch, denn es hat 3 Valenzelektronen ( $s^2 p^1$  Konfiguration), wovon eines ungepaart ist. Dieses wird sich in einem externen **Ferromagneten** sind Eisen, Nickel, Cobalt, Gadolinium, Dysprosium, Erbium (unterhalb der Curie Temperatur).

**Diamagneten** sind Edelmetalle wie Gold, Kupfer, Silber.

*Bemerkung:* Die Ionenrümpfe der Metalle haben häufig abgeschlossene Schalen, ihr Beitrag zur magnetischen Suszeptibilität ist in diesem Fall diamagnetisch. Der Beitrag der Leitungselektronen ist hingegen paramagnetisch. Da beide Beiträge in der gleichen Größenordnung  $\chi_d^{\text{band,core}}, \chi_p^{\text{band}} \approx 10^{-6}$  liegen, können Metalle para- oder diamagnetisch sein.

**Neon** hat als Edelgas ausschliesslich abgeschlossenen Schalen und ist daher ein Diamagnet.

## Druck/Hall Zeit I

Die Gleichung für die zeitliche Änderung des Drude-Impulses

$$\frac{d(m\vec{v})}{dt} = -\frac{m\vec{v}}{\tau} + \vec{F} \quad (1)$$

beinhaltet einen Kraftterm aufgrund der angelegten Felder (Lorentzkraft)

$$\vec{F} = -e (\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B}) \quad (2)$$

und den Reibungsterm, der zuerst anschaulich hergeleitet werden soll.

Zur Zeit  $t = 0$  sind die Wellenvektoren  $\vec{k}$  der Elektronen innerhalb der Fermi-Kugel gleichmässig verteilt (siehe Fig. 1a). Unter Einwirkung einer äusseren Kraft (hier: ein elektrisches Feld) über die Zeit  $t$  verschiebt sich die Fermikugel als Ganzes um den Vektor

$$\delta \vec{k} = -e \vec{E} t / \hbar \quad (3)$$

## Einstein Modell

Die thermische Energie von  $3N$  Moden ist in der harmonischen Näherung gegeben durch

$$U(T) = \sum_{\mathbf{k}} \hbar \omega(\mathbf{k}) \left[ n(\mathbf{k}) + \frac{1}{2} \right] = \int d\omega Z(\omega) \hbar \omega \left( \frac{1}{2} + \frac{1}{\exp(\frac{\hbar \omega}{kT}) - 1} \right)$$

Dabei ist  $n(\mathbf{k})$  die mittlere Anzahl Phononen mit Wellenvektor  $\mathbf{k}$  (Bose-Einstein-Verteilungsfunktion) und  $Z(\omega) = 3N \delta(\omega - \omega_E)$  die Zustandsdichte für  $3N$  Moden der Frequenz  $\omega_E$ . Die Integration ergibt

$$U(T) = 3N \hbar \omega_E \left( \frac{1}{2} + \frac{1}{\exp(\frac{\hbar \omega_E}{kT}) - 1} \right)$$

Der Beitrag zur spezifischen Wärmekapazität ist daher

$$c(T) = \frac{1}{V} \frac{dU}{dT} = \frac{3Nk}{V} \left( \frac{\hbar \omega_E}{kT} \right)^2 \frac{\exp(\frac{\hbar \omega_E}{kT})}{[\exp(\frac{\hbar \omega_E}{kT}) - 1]^2}$$

Für hohe Temperaturen  $T \gg \Theta_E$  erhält man

$$c(T) = \frac{3Nk}{V},$$

was dem klassischen Dulong-Petit Gesetz entspricht. Für tiefe Temperaturen  $T \rightarrow 0$  ergibt sich

$$c(T) = \frac{3Nk}{V} \left( \frac{\hbar \omega_E}{kT} \right)^2 \exp\left(-\frac{\hbar \omega_E}{kT}\right),$$

d.h. der Beitrag eines solchen Astes zur spezifischen Wärmekapazität nimmt für  $T \rightarrow 0$  exponentiell ab. Typische Werte für die Einstein-Temperatur liegen bei mehreren 100 K. In GaAs beispielsweise beträgt die Energie optischer Phononen ca. 35 meV, was  $\Theta_E \approx 420$  K entspricht. Die durch das Einstein-Modell beschriebenen optischen Phononen liefern also selbst bei Raumtemperatur nur einen kleinen Beitrag zur Wärmekapazität.

# Superconductivity

M.W.  $\vec{j} = \sigma \cdot \vec{E}$ ,  $\sigma \rightarrow \infty \Rightarrow \vec{E} = 0$   
 $\Rightarrow \vec{B} = 0$  (Meissner)  $\chi = -1$

Ohmsche Gesetz gilt in Supraleitern nicht mehr  
 $\vec{j} = -\frac{nse^2}{m} A \neq \sigma \vec{E}$   
 $\vec{j} = -e \vec{v}_s n_s$

# Cooper paare

Elektronen paaren sich zu  $-2e$  Paare.

# Entartung Neff berechnung

Im Falle von Silizium ist die Entartung des Leitungsbandes aufgrund der Gittersymmetrie zu berücksichtigen. Man multipliziert daher die effektive Zustandsdichte mit der entsprechenden Entartung (in diesem Fall 6):

$$N_c(T) = \sum_{i=1}^6 N_{c,i}(T) \Rightarrow \left(\frac{m_{c,eff}}{m_0}\right)^{3/2} = \sum_i \left(\frac{m_{c,i}}{m_0}\right)^{3/2} = 6 \left(\frac{m_c}{m_0}\right)^{3/2}$$

Einsetzen der in c) gegebenen Zahlenwerte liefert:

$$N_c(300K) = 2.85 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$$

Im Valenzband dagegen sieht die Situation etwas anders aus: Dieses ist zusammengesetzt aus zwei Loch-Bändern, dem "heavy-hole"- und dem "light-hole"-Band. Es existiert eine 4-fache Entartung, die aus den Werten der magnetischen Quantenzahl  $m_J = \pm 1/2, \pm 3/2$  der  $p_{3/2}$ -Zustände resultiert. In der Vorlesung wurde die Zustandsdichte  $D(E)$  hergeleitet, die in die effektive Zustandsdichte  $N_v$  eingeht. Hierbei wurden allerdings spinentartete Zustände angenommen. Diesen Faktor 2 müssen wir für die Löcher herausziehen, da die Entartung nicht von der Spinquantenzahl kommt.

Für die totale Masse ergibt sich

$$N_v = N_{v,hh} + N_{v,lh} \Rightarrow \left(\frac{m_{v,eff}}{m_0}\right)^{3/2} = 2 \left(\frac{m_{hh}}{m_0}\right)^{3/2} + 2 \left(\frac{m_{lh}}{m_0}\right)^{3/2} = 0.814$$

Die effektive Zustandsdichte ist somit

$$N_v = \frac{1}{8} \left(\frac{2m_0 k_B T}{\pi \hbar^2}\right)^{3/2} \left(\frac{m_{v,eff}}{m_0}\right)^{3/2} = 1.02 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$$

Anmerkung: Diese Rechnung vereinfacht die tatsächliche Situation in Silizium ein bisschen. Bei  $k = 0$  ist der sogenannte  $\Gamma_{25}$  Zustand 6-fach entartet. Zusätzlich zu den  $p_{3/2}$ -Zuständen ist das  $p_{1/2}$ -Niveau mit  $m_J = \pm 1/2$  zweifach entartet. Auf Grund der Spin-Bahn-Wechselwirkung spalten sich diese Zustände allerdings ab und liegen energetisch tiefer. Die Aufspaltungsenergie beträgt 44 meV.

In GaAs gilt für die effektive Masse im Valenzband wie bei Silizium

$$\left(\frac{m_v}{m_0}\right)^{3/2} = 2 \left(\frac{m_{hh}}{m_0}\right)^{3/2} + 2 \left(\frac{m_{lh}}{m_0}\right)^{3/2} = 0.75$$

Das Leitungsbandminimum in GaAs ist 2-fach entartet

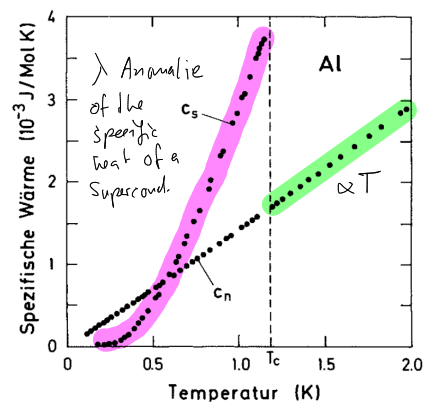
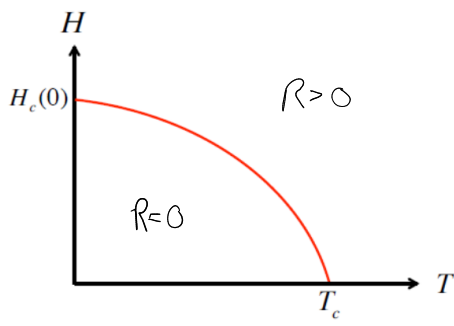
$$\left(\frac{m_{c,eff}}{m_0}\right)^{3/2} = \sum_i \left(\frac{m_{c,i}}{m_0}\right)^{3/2} = 2 \left(\frac{m_c}{m_0}\right)^{3/2}$$

Allgemein ist die intrinsische Ladungsträgerdichte gegeben als ( $n_i = \sqrt{n_p}$ ):

$$n_i(T) = \frac{1}{4\sqrt{2}} \left(\frac{2k_B T}{\pi \hbar^2}\right)^{3/2} (m_c m_v)^{3/4} e^{-\frac{E_g}{2k_B T}}$$

Einsetzen der Zahlenwerte bei Raumtemperatur (300K) liefert:

Si:  $n_i = 4.55 \cdot 10^9 \text{ cm}^{-3}$   
 GaAs:  $n_i = 5.78 \cdot 10^6 \text{ cm}^{-3}$



$$C_v \propto \gamma T_c e^{-5T_c/T} \quad (T < T_c)$$

$$C_v = \gamma T \quad (T > T_c)$$

# London Equation

$m \vec{v}_s = e \vec{E}$ ,  $\vec{j}_s = n_s e \vec{v}_s$   
 $\vec{j}_s = \frac{n_s e^2}{m} \vec{E}$  (I London)

$\langle \rho \rangle = \frac{dI}{dt} = m \langle v_s \rangle + eA = 0$  (Grundgleichung)

$\Rightarrow \vec{j} = n_s e \langle v_s \rangle = -n_s \frac{e^2}{m} A$  (I. London)

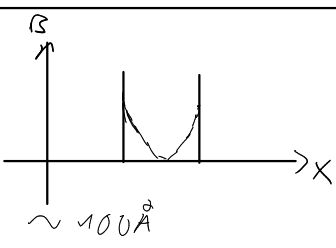
$\Rightarrow \vec{j} = -n_s \frac{e^2}{m} \frac{\partial A}{\partial t} \Rightarrow \text{div} \vec{A} = 0$  (L. Gauge)

$\Delta \vec{B} = \mu_0 \frac{n_s e^2}{m} \vec{B}$  (II. London)

# 1.D Problem

$B(x) = B(0) e^{-x/\lambda}$

$\lambda = \frac{m}{n_s(0) e^2} \frac{1}{\mu_0} \sim 100 \text{ \AA}$



Magnetfeld und Stromdichte fallen exponentiell ab nach innen

Die London-Gleichung lautet

$$\nabla \times \vec{j} = -\frac{e^2 n_s}{m} \vec{B} \Leftrightarrow \vec{j} = -\frac{e^2 n_s}{m} \vec{A}$$

Im Supraleiter gilt also das Ohmsche Gesetz  $\vec{j} = \sigma \vec{E}$  nicht mehr; vielmehr ist die Stromdichte proportional zum Vektorpotential.

Mit  $\nabla \times \vec{B} = \mu_0 \vec{j}$  erhalten wir  $\nabla \times (\nabla \times \vec{B}) = -\frac{\mu_0 e^2 n_s}{m} \vec{B}$ . Wir nutzen die Identität  $\nabla \times (\nabla \times \vec{B}) = \nabla(\nabla \cdot \vec{B}) - \nabla^2 \vec{B}$  sowie  $\nabla \cdot \vec{B} = 0$  und erhalten schliesslich das gesuchte Ergebnis

$$\nabla^2 \vec{B} = \frac{\mu_0 e^2 n_s}{m} \vec{B}$$

Für den Fall des halbunendlich ausgedehnten Supraleiters führt dies zu  $\partial_x^2 B_x - B_x / \lambda_L^2 = 0$  mit der Definition der Londonschen Eindringtiefe  $\lambda_L = (m / \mu_0 e^2 n_s)^{1/2}$ . Die physikalisch relevante Lösung lautet  $B_x(x) = B_0 \exp[-x / \lambda_L]$ .

# Druck/Hall Teil II

Infolge der Stöße mit Verunreinigungen, Gitterfehlern und Phononen relaxieren die Elektronen im Mittel nach der Streuzeit  $\tau$ . Bei abgeschaltetem Feld würden die Elektronen wieder den gleichverteilten Zustand in Fig. 1a einnehmen. Bei bestehendem Feld hingegen stellt sich ein stationärer Zustand ein, der durch eine um

$$\delta \vec{k} = -e \vec{E} \tau / \hbar \quad (4)$$

verschobene Fermikugel im k-Raum beschrieben wird. Der angelegten elektrischen Kraft wirkt also eine gleich grosse Kraft entgegen, die Reibungskraft. Nur so gibt es einen stationären Zustand, d.h. das Elektron wird bei einer endlichen Geschwindigkeit stabilisiert. Die Reibungskraft ist damit gegeben durch  $\hbar \delta \vec{k} / \tau$ . Die Driftgeschwindigkeit  $\vec{v}$  ist eine mittlere Geschwindigkeit der Elektronen in einem angelegten Feld. Die thermischen Grund-Geschwindigkeiten der Elektronen sind in alle Richtungen gleichverteilt und ergeben daher bei der Mittelung keinen Beitrag. Es gilt daher

$$m \vec{v} = \hbar \delta \vec{k} \quad (5)$$

und es folgt der Reibungsterm in Gleichung (1).

Im stationären Zustand verschwindet die zeitliche Ableitung in den Bewegungsgleichungen und man erhält für die Impulskomponenten in der Ebene

$$0 = -e E_x - \omega_c m v_y - \frac{m v_x}{\tau} \quad (6)$$

$$0 = -e E_y + \omega_c m v_x - \frac{m v_y}{\tau} \quad (7)$$

wobei  $\omega_c = \frac{eB}{m}$  die Zyklotronfrequenz ist. Einsetzen von  $\vec{j} = -ne\vec{v}$  liefert die Gleichungen für die Komponenten der Stromdichte:

$$0 = -ne^2 E_x + \omega_c m j_y + \frac{m j_x}{\tau} \quad (8)$$

$$0 = -ne^2 E_y - \omega_c m j_x + \frac{m j_y}{\tau} \quad (9)$$

Die in der y-Richtung gemessene Hallspannung erfolgt stromlos. Daher wird die Lorentzkraft aufgrund der  $v_x$ -Komponente gerade durch das entstehende elektrische Feld  $E_y$  kompensiert. Wir setzen  $j_y = 0$  und erhalten aus der ersten Gleichung

$$\rho(B) \equiv \frac{E_x}{j_x} = \frac{m}{ne^2 \tau} \quad (10)$$

Dies ist nicht vom Magnetfeld abhängig. Im Gegensatz dazu beobachtet man in verschiedenen Materialien und Systemen eine wesentliche Abhängigkeit  $\rho(B)$ , wofür die Quantenmechanik eine bessere Beschreibung liefert.

Mit  $j_y = 0$  liefert die zweite Gleichung

$$R_{Hl} \equiv \frac{E_y}{j_x B} = -\frac{1}{ne} \quad (11)$$