

Physik V - Formelsammlung

von Julian Merkert, Wintersemester 2006/07, Prof. v. Löhneysen

Bindungen

Potenzielle Energie zweier Atome im Abstand $r_{ij} = r_i - r_j$: $\phi_{ij} = -\frac{a}{r_{ij}^m} + \frac{b}{r_{ij}^n}$, $a, b, n, m > 0 \in \mathbb{R}$

Bindungsenergie: $U_b = \frac{N}{2} \sum_{i,j} \phi_{ij}$

Ionenbindung

Paarpotenzial: $\phi_{ij} = \pm \frac{Z^2 e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}} + \frac{b}{r_{ij}^n}$

- Z : Wertigkeit

$$\text{Bindungsenergie: } U_b = \frac{N}{2} \left(-\frac{Z^2 e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \underbrace{\sum_{j \neq i} \frac{\pm 1}{p_{ij}}}_{=\alpha_M} + \frac{1}{r^n} \underbrace{\sum_{j \neq i} \frac{b}{p_{ij}^n}}_{=\beta} \right)$$

- α_M : Madelung-Konstante, z.B. für NaCl $\alpha_M = 6 \cdot 1 - \frac{12}{\sqrt{2}} + \frac{8}{\sqrt{3}} - \dots$
- N : Ionenzahl
- p_{ij} : spezifisch für Gitterstruktur, aus $r_{ij} = r \cdot p_{ij}$ mit r =Abstand nächster Nachbarn

Bindungsenergie im Gleichgewichtsabstand: $U_b(r_0) = -\frac{N}{2} \alpha_M \frac{Z^2 e^2}{4\pi\epsilon_0 r_0} \left(1 - \frac{1}{n}\right)$

Metallische Bindung: Valenzelektronen frei beweglich

Paarpotenzial: $\phi_{ij} = -\frac{a}{r_{ij}} + \frac{b}{r_{ij}^2}$

Kovalente Bindung: Überlapp der Wellenfunktionen der Elektronenhüllennächster Nachbarn

Van-der-Waals-Bindung: Dipolmomente der Atome

Paarpotenzial / Lennard-Jones-Potenzial: $\phi_{ij} = 4\epsilon \left(\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right)$

Wasserstoff-Brückenbindung: Koordination des Protons zu elektronegativem Partner

Kristallstrukturen

Bravais-Gitter: Alle Punkte, die durch die Ortsvektoren $\vec{R} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3$ gegeben sind

- \vec{a}_i linear unabhängig: fundamentale Gittervektoren
- n_i : ganze Zahlen

Einheitszelle / Elementarzelle V_e :

- Def.: Volumen um einen Gitterpunkt, das bei periodischer Aneinandersetzung den Raum lückenlos füllt
- Beispiel 1: Parallelepiped $V_e = |\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)|$
- Beispiel 2: Wigner-Seitz-Zelle, Konstruktion:
 - Zeichne Verbindungen zu Nachbaratomen
 - Zeichne Mittelsenkrechten bzw. Mittelebenen dieser Strecken
 - W.S.-Zelle ist der Teil des Raumes, der dem zugehörigen Punkt näher ist als allen anderen Atomen des Gitters

Anordnung der Atome in der Elementarzelle = Basis

Kristallstruktur = Gitter + Basis

Symmetrieoperationen:

1. Translation
2. Rotation um $2\pi, \frac{2\pi}{2}, \frac{2\pi}{3}, \frac{2\pi}{4}, \frac{2\pi}{6}$ (\Rightarrow Zähligkeit 1, 2, 3, 4, 6)
3. Spiegelebenen $\Rightarrow m$
4. Inversion $\bar{1} \Rightarrow \vec{r} \rightarrow -\vec{r}$
5. Drehinversion: $\bar{2}, \bar{3}, \bar{4}, \bar{6}$
6. Schraubungen
7. Gleitspiegelungen

Gesamtheit der Symmetrieoperationen, die einen Punkt unverändert lassen = Punktgruppe

Fundamentale Gittertypen / Bravais-Gitter:

- Schiefwinkliges Gitter: $a \neq b, \varphi$ beliebig $\Rightarrow 2$ (Punktgruppe)
- Rechtwinkliges Gitter: $a \neq b, \varphi = 90^\circ \Rightarrow 2mm$
- Quadratgitter: $a = b, \varphi = 90^\circ \Rightarrow 4mm$
- Hexagonales Gitter: $a = b, \varphi = 120^\circ \Rightarrow 6mm$
- Rechtwinklig zentriertes Gitter: $a \neq b, \varphi = 90^\circ \Rightarrow 2mm$

Gittersymbole:

- P: simple cubic, sc
- I: body-center cubic, bcc
- F: face-center cubic, fcc
- C: basiszentriert
- R: rhomboedrisch

Dreidimensionale Bravais-Gitter:

Kristallsystem	Anzahl Bravais-Gitter	Gittersymbol	Achsen + Winkel
kubisch	3	P, I, F	$a = b = c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
tetragonal	2	P, I	$a = b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
orthorhombisch	4	P, C, I, F	$a \neq b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
monoklin	2	P, C	$a \neq b \neq c, \alpha = \beta = 90^\circ, \gamma \neq 90^\circ$
triklin	1	P	$a \neq b \neq c, \alpha \neq \beta \neq \gamma$
trigonal (rhomboedrisch)	1	R	$a = b = c, \alpha = \beta = \gamma < 120^\circ, \neq 90^\circ$
hexagonal	1	P	$a = b \neq c, \alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$

Häufige Kristallstrukturen:

- kubisch-flächenzentriert (fcc)
 - primitive Einheitszelle: Rhomboeder mit Volumen $V = \frac{a^3}{4}$
 - Abstand nächster Nachbarn: $\frac{a}{\sqrt{2}}$
 - Anzahl nächster Nachbarn / Koordinationszahl: 12
 - Stapelfolge: ABCABC...
- kubisch-raumzentriert (bcc)
 - Primitive Einheitszelle: $V = \frac{a^3}{2}$
 - Abstand nächster Nachbarn: $\frac{1}{2}\sqrt{3}a$
 - Anzahl nächster Nachbarn / Koordinationszahl: 8
- hexagonal-dichteste Packung (hcp)
 - wie fcc, aber Stapelfolge ABAB...
 - kein Bravais-Gitter, Basis besteht aus 2 Atomen bei $(0, 0, 0)$ und $(\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{2})$
- Diamant-Struktur
 - 2 fcc-Gitter [in $(0, 0, 0)$ und $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$], die um $\frac{1}{4}$ der Raumdiagonalen verschoben sind
 - Abstand nächster Nachbarn: $\frac{1}{4}\sqrt{3}a$
 - Anzahl nächster Nachbarn / Koordinationszahl: 4
- NaCl-Struktur
 - 2 fcc-Gitter [in $(0, 0, 0)$ und $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$]
 - Anzahl nächster Nachbarn / Koordinationszahl: 6
- CsCl-Gitter
 - bcc-Gitter, aber anderes Ion auf raumzentrierter Position
 - Anzahl nächster Nachbarn / Koordinationszahl: 8

Bezeichnung von Kristallebenen:

1. Schnittpunkte der Ebene mit Kristallachsen in Einheiten der fundamentalen Gittervektoren, z.B. 2, 3, 2
2. Bilde Kehrwert: $\frac{1}{2}, \frac{1}{3}, \frac{1}{2}$
3. Erweitere auf teilerfremde ganze Zahlen: 3, 2, 3 \Leftarrow Miller'sche Indices (h k l)
4. Für negative Richtungen: $(\bar{3} \bar{2} \bar{3})$
5. Notation:
 - Gleichwertige Ebenen: $\{h k l\}$
 - Gleichwertige Richtungen: $\langle h k l \rangle$

Beugung und reziprokes Gitter

Beugung einer einfallenden Welle

Amplitude am Ort B (allgemein): $A_B \sim e^{-i\omega_0 t} \int \varrho(\vec{r}) \cdot e^{-i(\vec{k}-\vec{k}_0)\vec{r}} d\vec{r}$

- $\vec{k} - \vec{k}_0 = \vec{K}$: Streuvektor

Streuung an periodischer Struktur: $A_B(\vec{k}) = \underbrace{\left(\sum_{\text{alle } \vec{R}} e^{-i\vec{k}\vec{R}} \right)}_{\text{Gitterfaktor}} \underbrace{\left(\sum_{\alpha} f_{\alpha}(\vec{k}) \cdot e^{-i\vec{k}\vec{r}_{\alpha}} \right)}_{\text{Strukturfaktor}}$

- $f_{\alpha}(\vec{k}) = \int_{\text{Atom}} \varrho_{\alpha}(\vec{r}') \cdot e^{-i\vec{k}\vec{r}'} d\vec{r}'$: Atomstrefaktor
- \vec{R} : Gittervektor
- \vec{r}_{α} : Atomposition α
- \vec{r}' : relativer Abstand zu α

Beugungsbedingungen von Laue / Laue-Gleichungen:

- Intensitätsmaxima für $\vec{a}_j \vec{k} = 2\pi m_j$
- m_j ganzzahlig
- \vec{a}_j aus $\vec{R} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3$

Reziprokes Gitter

Reziprokes Gitter = Menge aller Wellenvektoren \vec{G} , die ebene Wellen mit der Periodizität eines gegebenen Gitters bilden, also: $e^{i\vec{G}(\vec{R}+\vec{r})} = e^{i\vec{G}\vec{r}}$

- Reziproker Gittervektor: $\vec{G} = h\vec{g}_1 + k\vec{g}_2 + l\vec{g}_3$
- Reziprokes Gitter von bcc = fcc und umgekehrt

Fundamentale Gittervektoren des reziproken Gitters:

- $\vec{g}_1 = 2\pi \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}$
- $\vec{g}_2 = 2\pi \frac{\vec{a}_3 \times \vec{a}_1}{\vec{a}_2 \cdot (\vec{a}_3 \times \vec{a}_1)}$
- $\vec{g}_3 = 2\pi \frac{\vec{a}_1 \times \vec{a}_2}{\vec{a}_3 \cdot (\vec{a}_1 \times \vec{a}_2)}$

Streubedingung von Laue: $\vec{K} = \vec{G}$ (Streuvektor = reziproker Gittervektor)

Ein Vektor $\vec{G}_{hkl} = h\vec{g}_1 + k\vec{g}_2 + l\vec{g}_3$ des reziproken Gitters steht senkrecht auf den Netzebenen (h k l).

Bragg-Gesetz: $n\lambda = 2d_{hkl} \sin \theta$

1. Brillouin-Zone = Wigner-Seitz-Zelle des reziproken Gitters

- Auf den Grenzen der 1. Brillouin-Zone liegen die Spitzen aller Vektorenpaare \vec{k}, \vec{k}_0 , die die Streubedingung $\vec{k} - \vec{k}_0 = \vec{G}$ erfüllen.
- Weitere Brillouin-Zellen: Mittelsenkrechten zu weiter entfernten reziproken Gitterpunkten

Strukturfaktor: $S = \sum_{\alpha} f_{\alpha} \cdot e^{-i\vec{k}\vec{r}_{\alpha}}$

- α : Alle Atome in der Elementarzelle
- \vec{r}_{α} : Lage des Atoms in EZ
- S bestimmt die Intensität des (h k l)-Reflexes

Atomstrefaktor / Formfaktor: $f_\alpha = \int_{Atom} \varrho_\alpha(\vec{r}') \cdot e^{-i\vec{k}\vec{r}'} d\vec{r}'$

- $\varrho_\alpha(\vec{r}')$ hängt von Art der Strahlung ab
- falls $\varrho_\alpha(\vec{r}')$ kugelsymmetrisch: $f_\alpha = 4\pi \int \varrho_\alpha(r') \cdot r'^2 \cdot \frac{\sin Gr'}{Gr'} dr'$

Zusammenfassung:

- Aus Lage der Reflexe $\vec{K} = \vec{G}$ bei Beugung (verschiedene Strahlungen können verwendet werden, siehe Vorlesung) lassen sich Gestalt und Abmessungen der Elementarzelle eines Gitters bestimmen.
- Intensität der Reflexe lässt über Strukturfaktor und Formfaktor Rückschlüsse auf den Inhalt bzw. die Basis der Elementarzelle zu.

Temperaturabhängigkeit der Streuintensität:

- $\langle A_B \rangle = A_0 \cdot \underbrace{e^{-\frac{1}{6} \langle n^2 \rangle G^2}}_{\text{Debye-Waller-Faktor}}$
- $\langle I \rangle = I_0 \cdot e^{-2W}$ mit $W = \frac{1}{6} \langle u^2 \rangle G^2$

Gitterdynamik

Adiabatische Näherung:

- Bewegungen der Ionen wegen großer Masse viel langsamer als bei Elektronen \Rightarrow Anregungen des Elektronen-Systems erfolgen im Potenzial der momentanen Ionenkonfiguration.

Potenzial (harmonische Näherung):

$$U = \underbrace{\frac{1}{2} \sum_{i,j} \phi(\vec{R}_i - \vec{R}_j)}_{U_b} + \underbrace{\frac{1}{2} \sum_{i,j} (\vec{u}_i - \vec{u}_j) \cdot \vec{\nabla} \phi(\vec{R}_i - \vec{R}_j)}_{(*)} + \underbrace{\frac{1}{4} \sum_{i,j} [(\vec{u}_i - \vec{u}_j)^2 \vec{\nabla}]^2 \cdot \phi(\vec{R}_i - \vec{R}_j)}_{\text{harmon. Term}} + \underbrace{O(n^3) \dots}_{\text{Effekte höherer Ordnung}}$$

- \vec{r}_i : momentane Position des Atoms mit Gleichgewichtslage \vec{R}_i , $\vec{r}_i = \vec{R}_i + \vec{u}_i$
- U_b : statische Gitterenergie
- $(*) = \sum$ Kräfte auf Atom = 0 im Gleichgewicht
- Harmonischer Term: $U^{harm} = \frac{1}{4} \sum_{i,j} (u_{i\mu} - u_{j\mu}) \phi_{\mu\nu}(\vec{R}_i - \vec{R}_j) \cdot (u_{i\nu} - u_{j\nu})$
 - $\phi_{\mu\nu}(\vec{r}) = \frac{\partial^2 \phi(\vec{r})}{\partial r_\mu \partial r_\nu}$
 - $U^{harm} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} u_{i\mu} D_{\mu\nu}^{ij} u_{j\nu}$ mit $D_{\mu\nu}^{ij} = \delta_{ij} \sum_k \phi_{\mu\nu}(R_i - R_k) - \phi_{\mu\nu}(R_k - R_j)$

Dispersionsrelation der linearen einatomigen Kette: $\omega = 2\sqrt{\frac{f}{M}} \left| \sin \frac{ka}{2} \right|$

- f : Kopplungskonstante / Federkonstante
- M : Masse

Zustandsdichte der Schwingungsmoden $Z(\omega)$:

- Anzahl der Zustände (Schwingungsmoden) pro Volumen im Frequenzintervall $[\omega, \omega + d\omega]$
- Oder: Energie-Zustandsdichte $Z(E)$
- $Z(\omega) d\omega = \frac{1}{\pi} \frac{1}{\frac{d\omega}{dk}} d\omega$
- $Z(\omega) d\omega = \frac{2}{\pi a} \frac{d\omega}{\sqrt{\omega_m^2 - \omega^2}}$
- $\int Z(\omega) d\omega = \frac{N}{V}$, Anzahl der Zustände pro Volumen

Van-Hove-Singularität: $\frac{d\omega}{dk} = 0$

Lineare zweiatomige Kette: $\omega_{\pm}^2 = f \cdot \left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M}\right) \pm f \cdot \sqrt{\left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M}\right)^2 - \frac{4}{mM} \sin^2 \frac{ka}{2}}$

- $\omega_+(k)$: optischer Zweig
- $\omega_-(k)$: akustischer Zweig

Phonon: Quasi-Impuls $\hbar \vec{k}$

- Erhaltung nur bis auf einen reziproken Gittervektor

Thermische Eigenschaften des Gitters

Innere Energie des Kristalls: $U(T) = \underbrace{U_b}_{\text{Bindungsenergie}} + \underbrace{\frac{1}{2} \sum_{\vec{k},s} \hbar \omega_s(\vec{k})}_{\text{Nullpunktsenergie}} + \underbrace{\sum_{\vec{k},s} \frac{\hbar \omega_s(\vec{k})}{e^{\frac{\hbar \omega_s(\vec{k})}{kT}} - 1}}_{\text{Temperaturabhängigkeit}}$

Spezifische Wärme des Gitters: $c_V = \frac{9pNk}{V} \left(\frac{T}{\theta_D}\right)^3 \int_0^{\theta_D/T} \frac{y^4 e^y}{(e^y - 1)^2} dy$

- $y = \frac{\hbar \omega}{kT}$
- θ_D : Debye-Temperatur, $k \cdot \theta_D = \hbar \omega_D$

Thermischer Ausdehnungskoeffizient: $\alpha = \frac{1}{l} \frac{\partial l}{\partial T} \Big|_p = \frac{1}{3V} \frac{\partial V}{\partial T} \Big|_p = \frac{1}{3B} \frac{\partial p}{\partial T} \Big|_V$

- $B = -V \frac{\partial p}{\partial V} \Big|_T$: Kompressionsmodul
- $\alpha = \frac{\gamma \cdot c_V}{3B}$
 - $\gamma = \frac{\sum_{\vec{k},s} \gamma_{\vec{k},s} c_{V_s}(\vec{k})}{c_V}$: Grüneisen-Parameter
 - $\gamma_{\vec{k},s} = -\frac{\partial \ln \omega_{\vec{k},s}}{\partial \ln V}$: Grüneisenzahl
 - Im Debye-Modell: $\gamma_{\vec{k},s} = -\frac{\partial \ln \omega_D}{\partial \ln V}$

Wärmeleitfähigkeit κ : $\dot{q} = -\kappa \vec{\nabla} T$

- \dot{q} : Wärmestromdichte
- $\kappa = \kappa^{\text{Phononen}} + \kappa^{\text{Elektronen}}$
- $\kappa = \frac{1}{3} \sum_{\vec{k},s} v_{\vec{k},s}^2 \tau_{\vec{k},s} c_{\vec{k},s}(k)$
 - $c_{\vec{k},s}$: spezifische Wärme
 - häufig $l_{\vec{k},s} = v_{\vec{k},s} \cdot \tau_{\vec{k},s}$: mittlere freie Weglänge

Dielektrische Eigenschaften von Isolatoren

Mikroskopisches elektrisches Feld: $\vec{\nabla} \vec{E}^{\text{mikro}}(\vec{r}) = \frac{1}{\epsilon_0} \rho^{\text{mikro}}(\vec{r})$

Makroskopische dielektrische Verschiebung: $\vec{\nabla} \cdot \vec{D}(\vec{r}) = \vec{\nabla} \cdot (\epsilon_0 \vec{E}(\vec{r}) + \vec{P}(\vec{r})) = 0$

- \vec{P} : dielektrische Polarisation, gemittelt über Einheitszelle
- \vec{E} : makroskopisches elektrisches Feld

Lokales Feld am Ort eines Atoms: $\vec{E}^{\text{lok}} = \vec{E}_0 + \vec{E}_1 + \vec{E}_2 + \vec{E}_3$

- $\vec{E}_i = -\frac{1}{\epsilon_0} N_i \vec{P}$: Feld durch Dipole in Probe

- N_i : Depolarisationsfaktor, $N_1 + N_2 + N_3 = 1$ ($\Rightarrow N = \frac{1}{3}$ für Kugel)

Lorentz-Beziehung für kubische Symmetrie: $\vec{E}^{lok}(\vec{r}) = \vec{E}(\vec{r}) + \frac{1}{3\epsilon_0} \vec{P}$

- $\vec{E}^{lok}(\vec{r}) = \frac{\epsilon+2}{3} \vec{E}(\vec{r})$
- $\vec{D} = \epsilon_0 \epsilon \vec{E} = \epsilon_0 \vec{E} + \vec{P}$
- $\vec{P} = (\epsilon - 1) \epsilon_0 \vec{E} = \chi \epsilon_0 \vec{E}$

Clausius-Mosolli-Beziehung: $\frac{\epsilon-1}{\epsilon+1} = \frac{1}{3\epsilon_0} \frac{1}{V} \sum_j N_j \alpha_j$

- α_j : Polarisierbarkeit eines Atoms, $\vec{p} = \alpha \vec{E}^{lok}$ mit \vec{p} atomares Dipolmoment
- $\Leftrightarrow \epsilon(\omega) = \epsilon(\infty) + \frac{\epsilon(\infty) - \epsilon(0)}{\frac{\omega^2}{\omega_T^2} - 1}$
 $- \omega_T^2 = \bar{\omega}^2 \cdot \left(\frac{\epsilon(\infty)+2}{\epsilon(0)+2} \right)$

Das freie Elektronengas

Ohm'sches Gesetz: $\vec{j} = \sigma \cdot \vec{E}$

Drude-Gleichstrom-Leitfähigkeit: $\sigma = \frac{n \cdot e^2 \cdot \tau}{m}$

Drude-Wechselstrom-Leitfähigkeit: $\sigma(\omega) = \frac{\sigma_0}{1 - i\omega\tau}$

Fermi-Wellenvektor, Radius der Fermi-Kugel: $k_F = (3 \cdot \pi^2 \cdot n)^{\frac{1}{3}}$

- $n = \frac{N}{V}$

Fermi-Impuls: $p_F = \hbar \cdot k_F$

Fermi-Energie: $E_F = \frac{\hbar^2 \cdot k_F^2}{2m}$

Fermi-Geschwindigkeit: $v_F = \frac{p_F}{2m}$

Fermi-Temperatur: $T_F = \frac{E_F}{k}$

Ein-Elektronen-Zustandsdichte: $D(E) = \frac{1}{2\pi^2} \cdot \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \cdot E^{\frac{1}{2}}$

- $D(E_F) = \frac{3}{2} \frac{n}{E_F}$

Fermi-Dirac-Verteilungsfunktion: $f_i^N = \frac{1}{e^{(E_i - \mu)/kT} + 1}$

- = Wahrscheinlichkeit, dass ein Elektron im i-ten Ein-Elektronen-Zustand ist, falls System im thermischen Gleichgewicht

Spezifische Wärme: $c_V = \gamma \cdot T$

- $\gamma = \frac{\pi^2}{3} \cdot k^2 \cdot D(E_F)$: Sommerfeld-Konstante

Wärmeleitfähigkeit: $\kappa = \frac{1}{3} \cdot c_V \cdot l \cdot v_F^3$

- $l = v_F \cdot \tau = \frac{\hbar \cdot k_F}{n \cdot e^2 \cdot \rho}$: freie Weglänge
- $c_V = \frac{\pi^2}{2} \cdot n \cdot k^2 \cdot \frac{T}{E_F}$

Elektronen im periodischen Potential

Bloch-Theorem:

- Die Eigenfunktionen der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung sind von der Form $\Psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}} \cdot u_{n,\vec{k}}(\vec{r})$ mit $u_{n,\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}) = u_{n,\vec{k}}(\vec{r})$ für alle Gittervektoren \vec{R} .
- $\Leftrightarrow \Psi_{n,\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}) = e^{i\vec{k}\vec{R}} \cdot \Psi_{n,\vec{k}}(\vec{r})$
- Zu jedem \vec{k} gibt es viele Lösungen (so viele wie reziproke Gitterpunkte), Unterscheidung durch Bandindex n , diskrete Energiewerte $E_n(k)$
- Quasiimpuls für Elektronen: $\vec{p} = \hbar \cdot \vec{k}$
- $\Psi_{n,\vec{k}+\vec{G}}(\vec{r}) = \Psi_{n,\vec{k}}(\vec{r})$
- $E_{n,\vec{k}+\vec{G}} = E_{n,\vec{k}}$
- Ein-Elektronen-Zustände im periodischen Gitter lassen sich durch eine Schar von Energieflächen $E_n(\vec{k})$ beschreiben, die die Periodizität des reziproken Gitters haben: $E_n(\vec{k})$ Energiebänder

Beziehung zwischen el. Zustandsdichte und Bandstruktur: $D_n(E) = \int_{S_n(E)} \frac{dS}{4\pi^3} \frac{1}{|\nabla_{\vec{k}} E_n(\vec{k})|}$

- S_n : Fläche konstanter Energie in primitiver Einheitszelle des Kristalls, z.B. 1. Brillouin-Zone

Van-Hove-Singularitäten: $\nabla_{\vec{k}} E(\vec{k}) = 0$

Halbklassische Dynamik von Kristallelektronen

Effektive Masse m^* :

- Kristallelektronen verhalten sich unter Einwirkung äußerer Kräfte, als ob sie eine Masse hätten, die durch den Tensor $\left(\frac{1}{m^*}\right)_{ij}^{-1}$ gegeben ist, gegeben durch die Krümmung des $E(\vec{k})$ -Verlaufs

Boltzmann-Gleichung: $\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \nabla_{\vec{r}} f + \vec{F} \frac{1}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} f = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{Stöße}}$

- Beschreibt die Änderung der Verteilungsfunktion der Ladungsträger durch äußere Felder und Stöße
- \vec{F} : Äußere Kraft
- Linke Seite: „Driftterme“ durch äußere Felder
- Rechte Seite: „Stoßterm“

Linearisierte Boltzmann-Gleichung: $f(\vec{k}) \approx f_0(\vec{k}) + \frac{e}{\hbar} \cdot \tau(\vec{k}) \cdot \vec{E} \cdot \nabla_{\vec{k}} f_0(\vec{k})$

- f_0 : Fermi-Dirac-Verteilungsfunktion
- τ : Relaxationszeit

Elektrische Leitfähigkeit: $\sigma = \frac{e^2}{4\pi^3 \hbar} \int_{E(\vec{k})=E_F} \frac{v_x^2(\vec{k})}{v(\vec{k})} \cdot \tau(\vec{k}) dS$

- Im parabolischen Band: $\sigma = \frac{n \cdot e^2 \cdot \tau(E_F)}{m^*}$

Halbleiter

Einteilung:

- Isolator: alle Bänder entweder voll oder leer
 - Charakterisiert durch Energielücke E_g
- Metall: wenigstens ein Band teilweise gefüllt
- Intrinsischer Halbleiter: elektronische Eigenschaften werden durch thermische Anregung vom Valenzband ins Leitungsband bestimmt
- Extrinsischer Halbleiter: Eigenschaften durch Ladungsträger aus Verunreinigungen (Störstellen) bestimmt

Produkt der Ladungsträgerdichten: $n \cdot p = N \cdot P \cdot e^{-(E_L - E_V)/kT} = N \cdot P \cdot e^{-E_g/kT}$

- $n(T)$: Dichte der Elektronen im Leitungsband
- $p(T)$: Dichte der Löcher im Valenzband
- $N(T) = \frac{1}{4} \left(\frac{2 \cdot m_L^* \cdot k \cdot T}{\pi \cdot \hbar^2} \right)^{3/2}$
- $P(T) = \frac{1}{4} \left(\frac{2 \cdot m_V^* \cdot k \cdot T}{\pi \cdot \hbar^2} \right)^{3/2}$

Elektronendichte im intrinsischen Halbleiter: $n_i(T) = \frac{1}{4} \left(\frac{2kT}{\pi\hbar^2} \right)^{3/2} (m_L^* m_V^*)^{3/4} \cdot e^{-E_g/2kT}$

Chemisches Potential im intrinsischen Halbleiter: $\mu_i = E_V + \frac{E_g}{2} + \frac{3}{4} \cdot k \cdot T \cdot \ln \frac{m_V^*}{m_L^*}$

- Für $T = 0$ genau in der Mitte der Energielücke

Dotierte Halbleiter

- Donatoren liefern zusätzliche Elektronen ins Leitungsband, höhere Valenz als Wirtsmetall
 - Donatorzustände E_D befinden sich dicht unterhalb E_L (Leitungsband)
- Akzeptoren liefern zusätzliche Löcher ins Valenzband, niedrigere Valenz als Wirtsmetall
 - Akzeptorzustände E_A befinden sich dicht oberhalb E_V (Valenzband)
- \Rightarrow Es ist sehr viel leichter, thermisch ein Elektron aus dem Donatorniveau ins Leitungsband anzuregen, oder aus dem Valenzband in die Akzeptorniveaus, als aus dem Valenzband ins Leitungsband.
- Elektronen- / Löcherdichte im intrinsischen Fall ($n_i \gg |N_D - N_A|$): $n, p \approx n_i \pm \frac{1}{2}(N_D - N_A)$
- Elektronen- / Löcherdichte im extrinsischen Fall ($n_i \ll |N_D - N_A|$):
 - n-Halbleiter: $N_D > N_A \rightarrow n = N_D - N_A, p = \frac{n_i^2}{N_D - N_A} \ll n$
 - p-Halbleiter: $N_A > N_D \rightarrow p = N_A - N_D, n = \frac{n_i^2}{N_A - N_D} \ll p$