

Festkörperphysik

Achim Kittel

Energie- und Halbleiterforschung

Fakultät 5, Institut für Physik

Büro: W1A 1-102

Tel.: 0441-798 3539

email: kittel@uni-oldenburg.de

Sommersemester 2005

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	2
1.1	Aggregatzustände von Materie	2
1.2	Valenzen	3
1.3	Koordinationszahl	3
2	Kristallstruktur	5
2.1	Translationssymmetrie	5
2.2	Die fünf möglichen verschiedenen Symmetriefformen in zwei Dimensionen — vollständige Parkettierung (mit Bravais-Gittern)	6
2.2.1	Ebenes Parallelogramm-Gitter	6
2.2.2	Ebenes Rechteck-Gitter	7
2.2.3	Ebenes Quadrat-Gitter	7
2.2.4	Ebenes zentriertes Rechteck-Gitter	7
2.2.5	Ebenes hexagonales Gitter (kein Bravais-Gitter)	8
2.2.6	Existieren noch weitere Gitter?	9
2.3	Dreidimensionale Gitter	10
2.3.1	Triklin	10
2.3.2	Monoklin	11
2.3.3	Orthorhombisch	11
2.3.4	Tetragonal	13
2.3.5	Hexagonal	13
2.3.6	Trigonal oder Rhomboedrisch	14
2.3.7	Kubisch	14
2.3.8	Zusammenfassung — Die sieben Kristallsysteme	16
2.3.9	Definition: Elementarzelle	16
2.4	Die wichtigsten Gitter und ihre geometrischen Eigenschaften	17
2.4.1	Einfaches kubisches Gitter	17
2.4.2	Kubisches raumzentriertes Gitter (BCC)	17
2.4.2.1	Beispiele für Elemente mit einem kubisch raumzentrierten Gitter	18
2.4.3	Kubisches flächenzentriertes Gitter (FCC)	19
2.4.3.1	Beispiele für Elemente mit einem kubisch flächenzentrierten Gitter	19
2.4.4	Das Diamant-Gitter	20
2.4.4.1	Beispiele für Elemente mit einem Diamant-Gitter	21

2.4.5	Das Graphit-Gitter	21
2.4.6	Hexagonale Kugelpackung	22
2.4.6.1	Hexagonal dichte Kugelpackung (hexagonal close-packed hcp)	22
2.4.6.2	Beispiele für Elemente mit hexagonal dichter Kugelpackung	23
2.4.7	Binäre Kristalle	23
2.4.7.1	Das kubisch flächenzentrierte Gitter — die NaCl-Struktur	23
2.4.7.2	Beispiele für Kristalle mit Natriumchlorid-Struktur	24
2.4.7.3	Die Caesiumchlorid-Struktur	25
2.4.7.4	Beispiele für Kristalle mit Caesiumchlorid-Struktur	25
2.4.7.5	Die Zinkblende-Struktur und die Wurzit-Struktur	25
2.4.7.6	Beispiele für Kristalle mit Zinkblende-Struktur	26
2.4.7.7	Die Fluorapat- oder Fluorid-Struktur	26
2.4.7.8	Die Rutil-Struktur	27
2.4.7.9	Die Perowskit-Struktur	27
2.4.8	Nicht ideale/periodische Strukturen	28
2.5	Die Wigner-Seitz-Zelle	28
2.6	Kristallsymmetrien	29
2.6.1	Beschreibung der Operationen	30
2.6.2	Die zehn Punktgruppen-Symmetrieeoperationen	31
2.6.3	Objekte mit den fünf kubischen kristallographischen Punktgruppen	32
2.6.4	Die Nomenklatur der kubischen kristallographischen Punktgruppen nach Schönflies	32
2.6.5	Die Nomenklatur der nicht-kubischen kristallographischen Punktgruppen nach Schönflies	33
2.6.6	Die 27 nicht-kubischen kristallographischen Punktgruppen	34
2.6.7	Die 32 Kristallklassen	35
2.6.8	Einführung von zusätzlichen Translationssymmetrieelementen	35
2.6.9	Punktgruppen und Raumgruppen	38
2.7	Beugung an periodische Strukturen — reziprokes Gitter	38
2.7.1	Allgemeine Betrachtungen	38
2.7.2	Energieabhängigkeit des Probenstrahls zur Strukturanalyse	40
2.7.3	Beschreibung der Beugung	41
2.7.4	Periodische Strukturen und reziprokes Gitter	42
2.7.5	Streuung an periodischen Strukturen	43
2.7.6	Millersche Indizes	46
2.7.7	Braggsche Deutung der Röntgenbeugung	47
2.7.8	von Laue Formulierung der Röntgenbeugung	49
2.7.9	Die Brillouin-Zone	50
2.7.10	Der Strukturfaktor	51
2.8	Experimentelle Methoden der Strukturanalyse und deren Darstellung in der Ewald-Konstruktion	52
2.8.1	Die Laue-Methode	52
2.8.2	Die Drehkristall-Methode	54
2.8.3	Die Pulver- oder Debye-Scherrer Methode	57

2.9	Einige Beispiele für Partikelstrahlen	60
2.9.1	Niedrigenergie Elektronen Beugung — LEED	60
2.9.2	Heliumstrahlen	61
2.9.3	Neutronenstreuung	61
2.10	Kristallfehler	62
2.10.1	Fehlstellen im Gitter	63
2.10.2	Diffusion	64
2.10.3	Farbzentren	65
2.10.4	Versetzungen	67
2.10.5	Versetzungen und Kristallwachstum	68
3	Bindungen im Festkörper	71
3.1	Allgemeine Bemerkungen	71
3.1.1	Das Periodensystem der Elemente	72
3.2	Die Form der Orbitale	74
3.2.1	Hybridisierung	75
3.3	Die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung	77
3.4	Van der Waals-Wechselwirkung	78
3.4.1	Repulsion	79
3.4.2	Einige Eigenschaften von Edelgaskristallen	80
3.4.3	Gitterkonstanten im Gleichgewicht	80
3.4.4	Bindungsenergie	81
3.4.5	Gleichgewichts-Kompressionsmodul	82
3.4.6	Vergleich zwischen Theorie und Experiment	82
3.5	Die kovalente Bindung	82
3.6	Die ionische Verbindung	85
3.6.1	Elektrostatische- oder Madelung-Energie	86
3.6.2	Die Berechnung der Madelung-Konstanten	87
3.6.3	Elektronegativität	88
3.7	Die metallische Verbindung	88
3.8	Die Wasserstoffbrücken-Verbindung	89
3.9	Die elastische Dehnung	89
3.9.1	Dilation	91
3.9.2	Spannungskomponenten	91
4	Dynamik von Kristallgittern	94
4.1	Unzulänglichkeiten des statischen Gittermodells	94
4.2	Phononen	95
4.2.1	Harmonische Näherung	95
4.2.2	Das einatomige Gitter	96
4.2.2.1	Longitudinale Phononen	96
4.2.2.2	Beschränkung auf die erste Brillouin-Zone	99
4.2.2.3	Experimentelle Bestimmung der Kraftkonstante	99
4.2.2.4	Transversale Phononen	100

4.2.3	Das zweiatomige Gitter	101
4.2.3.1	Transversale Phononen	105
4.2.3.2	Phononen in drei Dimensionen	106
4.2.4	Quantisierung einer elastischen Welle	106
4.2.5	Der Impuls eines Phonons	107
4.3	Der phononische Anteil an der spezifischen Wärme	108
4.3.1	Abzählen der Eigenschwingungen	109
4.3.1.1	Die Zustandsdichte im Eindimensionalen	109
4.3.1.2	Die Zustandsdichte im Dreidimensionalen	111
4.3.1.3	Das Debye-Modell der Zustandsdichte	112
4.3.1.4	Debyesches T^3 -Gesetz	114
4.3.1.5	Das Einstein-Modell der Zustandsdichte	116
4.3.1.6	Vergleich zwischen Phononen und Photonen	117
4.4	Streuung an zeitlich veränderlichen Strukturen — Phononen-Spektroskopie	118
4.4.1	Vergleich Neutronen- und Photonen-Spektroskopie	119
4.4.2	Die Raman-Spektroskopie	120
4.4.3	Die Neutronen-Spektroskopie	122
4.5	Effekte anharmonischer Gitterwechselwirkung	124
4.5.1	Die Wärmeausdehnung	124
4.5.2	Die Wärmeleitung	125
4.5.3	Umklapp-Prozesse	127
4.5.4	Abschließende Bemerkungen zu Phononen	128
5	Elektronen in Festkörpern	132
5.1	Das freie Elektronengas	132
5.1.1	Das Drude-Modell	132
5.1.1.1	Die elektrische Leitfähigkeit im Drude-Modell	133
5.1.1.2	Hall-Effekt und Magnetwiderstand	133
5.1.1.3	Die thermische Leitfähigkeit im Drude-Modell	135
5.1.2	Das freie Elektronengas im Potentialkasten	136
5.1.3	Das Fermi-Gas bei 0K	139
5.1.4	Die Temperaturabhängigkeit der Fermi-Dirac-Verteilung	142
5.1.5	Die spezifische Wärme der Elektronen	144
5.1.6	Elektrostatische Abschirmung in einem Fermi-Gas — Mott-Übergang	147
5.1.7	Glühemission bei Metallen	149
5.1.8	Unzulänglichkeiten des freien Elektronen-Modells	152
5.1.8.1	Widersprüche bei den Transportkoeffizienten freier Elektronen	152
5.1.8.2	Widersprüche bei den statischen thermodynamischen Voraussagen	153
5.1.8.3	Grundsätzliche Fragen	153
5.1.8.4	Zusammenfassung der Annahmen des freien Elektronengases	153
5.2	Energiebänder	154
5.2.1	Allgemeine Überlegungen	154
5.2.2	Näherung des quasi-freien Elektrons	157

5.2.3	Näherung der stark gebundenen Elektronen	161
5.2.4	Anzahl der Quantenzustände im Band	163
5.2.5	Beispiele für Bandstrukturen	165
5.2.6	Fermi-Flächen	166
5.2.7	Boltzmann-Transportgleichung	171
5.2.8	Thermoelektrische Effekte	173
6	Halbleiter	175
6.1	Banddiagramme und Energielücken	175
6.1.1	Zyklotronresonanz	177
6.2	Ladungsträgerdichte im intrinsischen Halbleiter	178
6.3	Dotierung von Halbleitern	180
6.3.1	Ladungsträgerdichten in dotierten Halbleitern	182
6.4	Leitfähigkeit von Halbleitern	185
6.5	Der pn-Übergang	189
6.5.1	Der pn-Übergang im thermischen Gleichgewicht	190
6.5.2	Der vorgespannte pn-Übergang	191
6.6	Halbleiterbauelemente	193
6.6.1	Der Bipolartransistor	193
6.6.2	Feldeffekttransistoren	195
6.6.3	Laserdioden	196
7	Supraleitung	199
7.1	Entdeckung der Supraleitung	199
7.2	Der supraleitende Zustand — ein makroskopischer Quantenzustand	201
7.3	Der Meisner-Ochsenfeld-Effekt	203
7.4	Die London-Gleichungen	205
7.5	Das Flussquant	206
7.6	Supraleiter erster und zweiter Art	208
7.7	Die Josephson-Gleichungen	209
7.8	Das Superconducting Quantum Interference Device	212