

# Festkörperphysik

Achim Kittel

Energie- und Halbleiterforschung

Fakultät 5, Institut für Physik

Büro: W1A 1-102

Tel.: 0441-798 3539

email: [kittel@uni-oldenburg.de](mailto:kittel@uni-oldenburg.de)

Sommersemester 2005

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>2</b>
1.1	Aggregatzustände von Materie . . . . .	2
1.2	Valenzen . . . . .	3
1.3	Koordinationszahl . . . . .	3
<b>2</b>	<b>Kristallstruktur</b>	<b>5</b>
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-Symmetrieoperationen . . . . .	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
<b>3</b>	<b>Bindungen im Festkörper</b>	<b>71</b>
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
<b>4</b>	<b>Dynamik von Kristallgittern</b>	<b>94</b>
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
<b>5</b>	<b>Elektronen in Festkörpern</b> . . . . .	<b>132</b>
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
<b>6</b>	<b>Halbleiter</b>	<b>175</b>
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
<b>7</b>	<b>Supraleitung</b>	<b>199</b>
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