

„Kristallstruktur = Punktgitter + Kristallbasis“

Bravais-Gitter:

- Sind die möglichen [mathematischen] Punktgitter der Kristallographie

$$\vec{R} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3, \quad n_i \in \mathbb{Z}, i \in \{1, 2, 3\}$$

- \vec{a}_i sind die primitiven Gittervektoren; $|\vec{a}_i|$ heißen Gitterkonstanten.

- In der primitiven Gitterzelle [Elementarzelle], aufgespannt durch \vec{a}_i , ist nur genau ein Gitterpunkt enthalten.

Wigner-Seitz-Zelle [WSZ]:

Raum, in dem jeder Ort einem ausgewählten Gitterpunkt näher ist, als jedem anderen Gitterpunkt.

Brillouine-Zonen [BZ]:

n -te BZ: Der Bereich im reziproken Raum, der durch Überkreuzen von genau $[n - 1]$ Bragg-Flächen [nicht weniger und nicht mehr!] erreicht werden kann.

Zonen aller Ordnungen sind gleich groß und können meist auf 1. BZ [die entspricht der WSZ im reziproken Raum] „zurückgefaltet“ werden.

Symmetrieoperationen [3D]:

Drehung an einer Achse, Spiegelung an einer Ebene, Inversion [an einem Punkt], Drehinversion, Drehspiegelung.

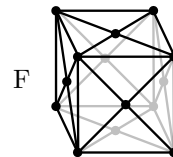
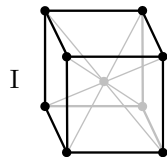
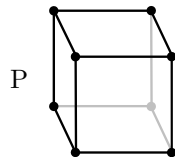
Es gibt Symmetrieoperationen ohne ortsfesten Punkt [**Translationsgruppe**], mit ortsfestem Punkt [**Punktgruppe**] und eine sukzessive Kombination von Elementen beider vorherigen [**Raumgruppe**].

Die 7 Kristallsysteme mit den 14 Bravais-Gittern in 3D:

Kristallsystem

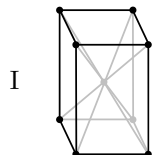
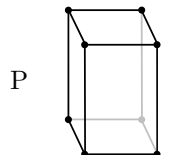
zugehörige Bravais-Gitter

kubisch
 $a = b = c$
 $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

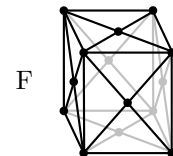
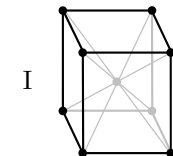
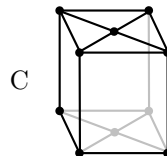
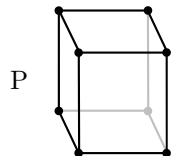


P - primitiv
 I - raumzentriert
 F - flächenzentriert
 C - basiszentriert

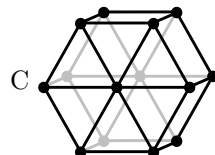
tetragonal
 $a = b \neq c$
 $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$



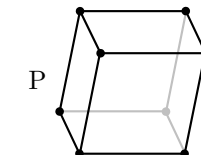
rhombisch
 $a \neq b \neq c$
 $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$



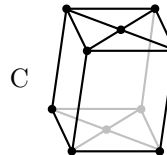
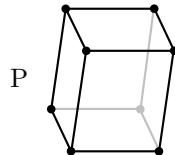
hexagonal
 $a = b \neq c$
 $\alpha = \beta = 90^\circ,$
 $\gamma = 120^\circ$



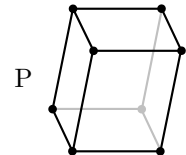
trigonal
 $a = b = c$
 $\alpha = \beta = \gamma < 120^\circ,$
 $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$



monoklin
 $a \neq b \neq c$
 $\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$

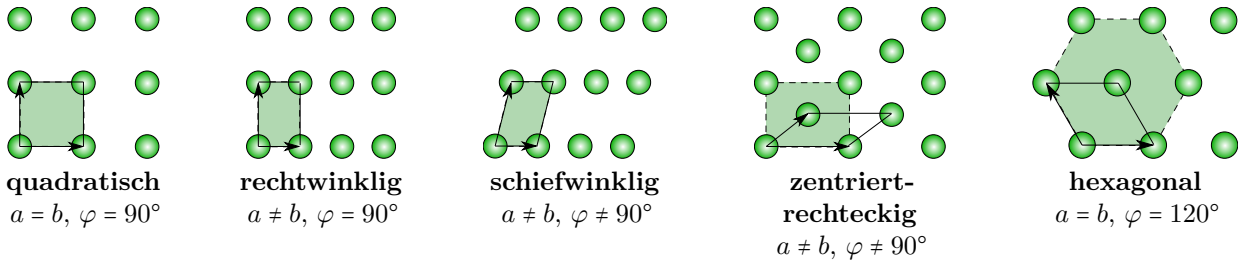


triklin
 $a \neq b \neq c$
 $\alpha \neq \beta \neq \gamma$



Das hexagonale Kristallsystem hat auch eine primitive Basis, welche aber wesentliche Eigenschaften des Kristalls nicht widerspiegelt.





Indizierung von Kristallelementen:

äquivalent $\hat{=}$ nach Symmetrieoperationen deckungsgleich

- Position in Elementarzelle [Bruchteile von Gittervektoren]: „0 $\frac{1}{2}$ 1“
- Achsen / Richtungen in kristallographisch äquivalenten Richtungen:
einer konkreten Richtung : „{ 0 $\frac{1}{2}$ 1 }“
„[0 $\frac{1}{2}$ 1]“
- Netzebenen über Millersche Indizes [kleinste gemeinsame Vielfache der Inversen der Achsenschnittpunkte der Ebene]
für alle kristallographisch äquivalenten Ebenen [-scharen]: „{ h k l }“
genau eine Ebene [-nschar]: „(h k l)“

hexagonale Kristalle: 4 millersche Indizes [z.B. (h k i l); es ist $i = -[h + k]$] -1 = „ $\bar{1}$ “

Strukturen: [max. Raumfüllung 74,048 % = $\frac{\pi}{3\sqrt{2}}$ - hcp [ABAB...], ccp [ABCABC...], dhcp [ABACABAC...]]

- hcp: hexagonal close packed mit 2-atomiger Basis [(0, 0, 0) und ($\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{2}$)], wobei $c_{\text{closed packed}} = \sqrt{\frac{8}{3}}a$.
- NaCl-Struktur: fcc mit 2-atomiger Basis [(0, 0, 0) und ($\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$)].
- CsCl-Struktur: sc mit 2-atomiger Basis [(0, 0, 0) und ($\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$)].
- Diamant-Struktur: fcc mit 2-atomiger Basis [(0, 0, 0) und ($\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}$)], alle Atome von der gleichen Art.
- Zinkblende-Struktur: fcc mit 2-atomiger Basis [(0, 0, 0) und ($\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}$)], 2 verschiedene Atom-Sorten.

Oberflächen:

- Oberflächenrelaxation: Netzebenenabstand der 1. zur 2. größer als im Kristall.
- Oberflächenrekonstruktion: anderes Gitter an Oberfläche als im Kristall.

Wood-Notation: $\underbrace{\{p, c\}}_{\text{primitive / centered}} \left(\frac{c_1}{a_1} \times \frac{c_2}{a_2} \right) R \alpha$, \bar{c}_1, \bar{c}_2 Oberflächen-, \bar{a}_1, \bar{a}_2 Kristallbasisvektoren, α [in °] Drehung der Oberflächen- zur Kristallbasis.

[z.B. Gold (111): $p(22 \times \sqrt{3}) R 0^\circ$ oder Gold (100): $p(5 \times 24) R 0^\circ$]

allgemeiner: Epitaxiematrix \underline{c} : $\begin{pmatrix} \bar{c}_1 \\ \bar{c}_2 \end{pmatrix} = \underline{c} \begin{pmatrix} \bar{a}_1 \\ \bar{a}_2 \end{pmatrix}$ [kommensurable E., point-on-line E., line-on-line E.]

Defekte [reale Kristalle]:

- intrinsische [Leerstellen, Zwischengitteratome], extrinsische [Versetzungen, Korngrenzen, Ausscheidungspartikel] D.
- Punktd. [\rightarrow atomar], Liniend. [\rightarrow makroskopisch], Flächend. [\rightarrow makroskopisch]
- im Kristall Anzahl Defekte \ll Gitterbausteine; bei amorphen Materialien beide etwa gleich häufig.

Die lokale Ordnung im FK kann mittels der Paar-Korrelationsfunktion $g(\bar{r}_1, \bar{r}_2) = \frac{1}{n_0^2} \langle n(\bar{r}_1)n(\bar{r}_2) \rangle$ beschrieben werden. ($\langle \dots \rangle$ bezeichnet die Mittelung über alle Atome, n_0 die mittlere Teilchendichte)

Für homogene, isotrope Materialien ist $g(r) = \frac{1}{n_0} n(r)$ einzig eine Funktion des Abstandes. Die [nicht normierte] radiale Verteilungsfunktion ist dann $\rho = 4\pi r^2 n_0 g(r)$.

[Idealkristall $\rho(r) = N(r) \sum_j \delta(r - r_j)$; amorpher FK $\rho(r)$ ist zufällig für $r > r_c$.]

Zur Realraum-Abbildung von Kristallstrukturen:

- TEM [transmission electron microscopy, Probe maximal einige 1 µm dick, bildet Elektronendichte ab],
- STM [scanning tunneling microscopy, Leitfähigkeit der Probenoberfläche abgebildet, hohe vertikale Auflösung $[I_{\text{tunnel}} \propto e^{a\Delta z}, a \in \mathbb{R}]$],
- AFM [atomic force microscopy, misst van der Waals Kräfte an Oberfläche, auch für Isolatoren].

Reziprokes Gitter: $\vec{R} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3$ beschreibe ein Bravais-Gitter im Realraum; dann wird das reziproke Gitter durch alle Gittervektoren $\vec{G} = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3$ gebildet, für die gilt $e^{i\vec{G}\vec{R}} = 1$.

[Dabei entspricht \vec{G} den Wellenvektoren \vec{k} ebener Wellen, welche an dem Gitter \vec{R} konstruktiv interferieren.]

In der Fourier-Zerlegung $f(\vec{r}) = \sum_{\vec{k}} f_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{r}}$ einer gitterperiodischen Funktion $f(\vec{r}) = f(\vec{r} + \vec{R})$ können entsprechend nur Raumfrequenzen $\vec{k} = \vec{G}$ auftreten.

Volumen der Einheitszelle $V_c = [\vec{a}_1 \times \vec{a}_2] \cdot \vec{a}_3$

Es ist: $\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{V_c} \vec{a}_2 \times \vec{a}_3$, $\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{V_c} \vec{a}_3 \times \vec{a}_1$, $\vec{b}_3 = \frac{2\pi}{V_c} \vec{a}_1 \times \vec{a}_2$; also $\vec{b}_j \cdot \vec{a}_i = 2\pi \delta_{ji}$.

[In Matrix-Darstellung $\underline{A} = (\vec{a}_1 \ \vec{a}_2 \ \vec{a}_3)$, $\underline{B} = (\vec{b}_1 \ \vec{b}_2 \ \vec{b}_3)$ und $\underline{B} = 2\pi [\underline{A}^T]^{-1}$.]

Der reziproke Gittervektor $\vec{G} = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3$ steht senkrecht auf der Ebenenschar $(h \ k \ l)$; der Netzebenenabstand dieser Ebenen ist dann

$$d_{hkl} = \frac{2\pi}{|\vec{G}_{\min}|} .$$

Beugung von Wellen an Kristallen:

- (i) Bragg-Bedingung: Elastische Streuung an Netzebenen des Gitters [!]: $2 d_{hkl} \sin(\theta) = n \lambda$, $n \in \mathbb{Z}$.
- (ii) Von Laue-Bedingung: Elastische Streuung der Welle \vec{k} an Gitter[!]punkten: $\vec{k}' - \vec{k} = \vec{G}$.
- (iii) Kinematische Beugungstheorie: Intensität der Streupunkte für eine Basis mit Basisatomen der atomaren Streudichte $\rho_{\text{atom},j}$ bei \vec{r}_j [Basisstredichte $\rho_B(\vec{r}) = \sum_j \delta(\vec{r} - \vec{r}_j) f_j$] und reziproken Gittervektoren \vec{G}_{hkl} ist:

$$I_{\text{streu}}^{\text{elast}} \propto \left| \underbrace{\sum_j e^{-i\vec{G}_{hkl}\vec{r}_j}}_{S_{hkl}} \overbrace{\int_{\text{Zelle}} \rho_{\text{atom},j}(\vec{x}) e^{-i\vec{G}_{hkl}\vec{x}} d^3x}^{f_j} \right|^2 \tag{1}$$

f_j beschreibt das atomare Streuvermögen eines jeden Basisatoms [„Atomformfaktor“]; S_{hkl} heißt Strukturfaktor.
[In Röntgenbeugung ist $f_j \propto Z$ der Anzahl Elektronen [\approx Kernladungszahl] $\Rightarrow I \propto Z^2$ für ein Element!]

- (iv) Für inelastisch Streuung tragen Phononen [auch bei $T = 0\text{K}$ ist Absorption möglich!] zur Streuung bei [Phononenimpuls \vec{q}]: $\vec{k}' - \vec{k} \pm \vec{q} = \vec{G}$ - erweiterte Laue-Bedingung .

Im zeitlichen Mittel ergibt sich $I_{\text{streu}}^{\text{inelast}} = |\langle S_{hkl} \rangle_t|^2 \approx I_{\text{streu}}^{\text{elast}} e^{-\frac{1}{3} \vec{G}^2 \langle \vec{u}^2(t) \rangle_t}$, wobei $u(t)$ die Auslenkung eines Atoms aus seiner Ruhelage beschreibt.

Laue Indizes [für Beugungsexperimente] $(h' \ k' \ l')$, Beugungsordnung n , Millersche Indizes $(h \ k \ l)$: $(h' \ k' \ l') = (nh \ nk \ nl)$

Experimentelle Beugungsmethoden:

- ~ Röntgenbeugungsmethoden:
 - Laue-Verfahren: Symmetrie und Orientierung eines Einkristalls mittels kontinuierlichem Spektrum.
 - Drehkristall-Verfahren: Netzebenenabstände [quantitativ] mittels Drehung eines Einkristalls und monochr. Strahl. .
 - Debye-Scherrer: Netzebenenabstände einer Pulverprobe mittels monochromatischer Strahlung.
- ~ Elektronenbeugungsmethoden:
 - LEED: *Low Energy Electron Diffraction* - 10 eV – 500 eV, im UHV, 1 – 3 Monolagen tief.
 - RHEED: *Reflection High Energy Electron Diffraction* - 10 keV – 50 keV, streifender Einfall, OF gleichzeitig bearbeitbar.
 - ED: *Electron Diffraction* - > 100 keV, in TEM [\rightarrow Transmission].

Bindungstypen:

kovalent Ausbildung gemeinsamer e^- -Paare zwischen Atomen; gerichtete Bindung.

Quantenmechanische Beschreibung nötig aufgrund auftretender Austauschenergien [Überlappintegral!]; dabei Vielteilchenfunktionen, die nicht analytisch lösbar sind → Numerik oder Näherungen [z.B.: LCAO [linear combination of atomic orbitals], Molekülorbitalnäherung, Valenzbindungsnaherung, ...].

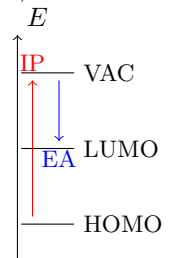
Für 2-Teilchen-System symmetrische Ortswellenfunktion mit antisymmetrischer Spinwellenfunktion allgemein der bindende Zustand. Für 1-Teilchen-System auch der Zustand symmetrischer Ortswellenfunktion bindend.

ionisch Ionisation beider Partner durch Elektronenübergang (einer mit niedriger Ionisationsenergie (IP), der andere mit hoher Elektronenaffinität (EA)); ungerichtete Bindung;

Paarpotential: $\varphi_{ij} = \pm \frac{Z^2 e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}} + \frac{B}{r_{ij}^n}$, $B = const., n > 1$.

$E_B = \varphi_{ij} + IP - EA$

	H	Li	K	Na	Cl	I
EA [eV]	0,7542	0,62	0,50	0,55	3,61	3,06
IP [eV]	13,598	5,392	4,341	5,139	12,968	10,451



metallisch viele (ähnliche) Atome mit nicht vollständig besetzten HOMOs an Bindung beteiligt; ungerichtete Bindung; delokalisierte Elektronenwellenfunktionen.

Wasserstoffbrücken schwache Bindung ionischen Charakters zwischen partialen Ladungsschwerpunkten [δ^+, δ^-].

Van-der-Waals Wechselwirkung zwischen fluktuierenden Dipolen [durch thermische Bewegung und die umher erzeugten elektrischen Felder]; tritt immer auf.

Lennard-Jones [Paar-Potential]: $E_{\text{pot}} = 4\epsilon \left[\underbrace{\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12}}_{\text{Pauli-Prinzip-Abstoßung}} - \underbrace{\left(\frac{\sigma}{r}\right)^6}_{\text{fluktuierende Dipole}} \right]$

Für gesmaten Kristall [N Gitterpunkte, nächster Nachbar-Abstand R_{NN}] $U_{\text{tot}} = 2N\epsilon \left[\left[A_{12} \frac{\sigma}{R_{NN}} \right]^{12} - A_6 \frac{\sigma}{R_{NN}} \right]^6$

	fcc	hcp	bcc	
A_6	14,4539	14,4549	12,253	GG-Abstand $R_0 = \left[2 \frac{A_{12}}{A_6} \right]^{1/6} \sigma$, $U_{\text{tot}}(R_0) = -\frac{N}{2} \epsilon \frac{A_6^2}{A_{12}}$
A_{12}	12,1319	12,1323	9,114	

Bindungsenergie:

Energiedifferenz zw. der Summe der E. aller reinen Atome/Moleküle und der Gesamte. des aus diesen gebildeten FK.

Madelungkonstante:

Verhältnis der Bindungsenergie eines Ions im Kristall zur Bindungsenergie eines Ions im einzelnen Ionenpaar.

Orbitale: idealisierte Ein-Teilchen-Zustände in einem effektiven Potential.

[Hauptquantenzahl $n \in \{1, 2, \dots\}$], Bahndrehimpuls $l \in \{0, 1, 2, \dots\}$, Magnetquantenzahl $m \in \{-l, -l+1, \dots, l-1, l\}$, Spinquantenzahl $s \in \{-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\}$ Radiale Aufenthaltswahrscheinlichkeit $W(r) dr = r^2 |R_{nl}|^2 dr$

Je mehr Valenzelektronen die Bindungspartner besitzen, desto wahrscheinlicher ist eine kovalente gegenüber einer ionischen Bindung.

Hybridisierung:

Linearkombination von Atomorbitalen um Gemessenes wiederzugeben; sinnvoll z.B. bei energetischer Entartung oder speziellen Symmetrien.

Phononen:

[Gruppengeschwindigkeit $v_g = \frac{d\omega}{dq}$]

Wellenvektor \vec{q} [$|\vec{q}| = \frac{2\pi}{\lambda}$], 1D-Kette harmonischer Oszillatoren [1 atomig, Abstand NN a , Auslenkung $u_s = u_{\text{max}} e^{-i[\omega t - sq a]}$, WW-Konstante von u_s und $u_{s\pm j}$ c_j]:

$\omega(q) = \sqrt{\frac{2}{M} \sum_{j=1}^{\infty} c_j [1 - \cos(qa)]}$, mit $qa \in [0, \pi)$ alles beschrieben.

[z.B. bis $j = 1$ [außer Metalle gut]: $\omega(q) = 2\sqrt{\frac{c_1}{M}} \left| \sin\left(\frac{qa}{2}\right) \right|$, bis $j = 2$ [Metalle]: $\omega(q) = 2\sqrt{\frac{c_1}{M} \left[\sin^2\left(\frac{qa}{2}\right) + \frac{c_2}{c_1} \sin^2(qa) \right]}$]

Für 2-atomige Basis $[M_1, M_2]$, 1D-Kette, NN-Näherung: $\omega_{a,o}^2 = \frac{C}{M_1 M_2} \left[M_1 + M_2 \mp \sqrt{[M_1 + M_2]^2 - 4M_1 M_2 \sin^2\left(\frac{qa}{2}\right)} \right]$

Analog für N -atomige Basis in D Dimensionen: D akustische Zweige und $D[N-1]$ optische Zweige [potentiell entartet].
[jeweils 1 longitudinale und $D-1$ transversale Schwingungen]

Freies Elektronengas für $T = 0$ K:

Drude-Sommerfeld-Model - Grundannahme: keine WW der leitenden e^- untereinander oder mit Atomrümpfen.
Einzig die e^- der äußersten Schale an Leitung beteiligt!

$\begin{aligned} \text{Besetzung} &= \text{Zustandsdichte} \cdot \text{Besetzungswahrscheinlichkeit} \\ \frac{dN}{dE} dE &= D(E) \cdot f(E, T) dE \end{aligned}$
--

Für ein Volumen $V = L_x L_y L_z$ mit Potential $\Phi(\vec{r}) = \begin{cases} 0 & , \vec{r} \in V \\ \infty & , \vec{r} \notin V \end{cases}$ ergibt die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung $\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \Phi \right] \Psi = E \Psi$ dann $\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{V}} e^{-i\vec{k}\vec{r}} & , \vec{r} \in V \\ 0 & , \vec{r} \notin V \end{cases}$ mit $E_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m}$ [vgl. freie Elektronen]. Mit periodischen, stetig diffbaren Randbedingungen ergibt sich $k_i = \frac{2\pi}{L_i} n_i$, $n_i \in \mathbb{N}_0$.

Das Volumen eines Zustands im \vec{k} -Raum ist in d Dimensionen $A_d = \prod_{i=1}^d \frac{2\pi}{L_i}$, mit dem Spin ergibt sich für die Zustandsdichte $Z_d(\vec{k}) = \underbrace{2}_{\text{Spin}} \frac{1}{A_d}$ und im Energie-Raum $[Z_d(\vec{k}) d^d k = D(E) dE]$:

3D: $D(E) = \frac{V}{2\pi^2} \left[\frac{2m}{\hbar^2} \right]^{\frac{3}{2}} \sqrt{E}$ 2D: $D(E) = \frac{A}{2\pi} \frac{2m}{\hbar^2}$ 1D: $D(E) = \frac{L}{2\pi} \left[\frac{2m}{\hbar^2} \right]^{\frac{1}{2}} \frac{1}{\sqrt{E}}$.

Fermi-Energie E_F : Grenzenergie, die bei $T = 0$ K im Grundzustand besetzte und unbesetzte Zustände abgrenzt.

[F.-Wellenvektor k_F , F.-Energie $E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}$, F.-Temperatur $T_F = \frac{E_F}{k_B}$, F.-Wellenlänge $\lambda_F = \frac{2\pi}{k_F}$, F.-Geschwindigkeit $v_F = \frac{\hbar k_F}{m}$]

Anzahl e^- : $N_d = \int_0^{k_F} Z(\vec{k}) d^d k$ [3D: $N_3 = 2 \frac{V}{[2\pi]^3} \left[\frac{4}{3} \pi k_F^3 \right] \Leftrightarrow k_F = \left[3\pi^2 \frac{N}{V} \right]^{\frac{1}{3}}$ $\frac{E_{\text{ges}}}{N} = \frac{3}{5} k_B T_F$

Freies Elektronengas für $T > 0$ K:

Fermi-Dirac-Verteilung: $f(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{k_B T}} + 1}$ Besetzungswahrscheinlichkeit , chemisches Potential μ .
[Def.: $\mu = \frac{\partial U}{\partial N} \Big|_{S,V}$]

$\mu(T = 0 \text{ K}) = E_F$ und für $T > 0$ K gilt näherungsweise: $\mu(T) = E_F - [k_B T]^2 \frac{\pi^2}{6} \frac{\frac{dD(E)}{dE} \Big|_{E=E_F}}{D(E_F)}$.

[Nach Sommerfeldentwicklung in 1. Näherung und über Teilchenzahlerhaltung.]

Wärmekapazität: $c_V = \frac{1}{V} C_V = \frac{1}{V} \frac{\partial U}{\partial T} \Big|_V$.

In 3D folgt: $\mu(T) = E_F \left[1 - \frac{\pi^2}{12} \left[\frac{T}{T_F} \right]^2 \right]$, $c_V = \frac{\pi^2}{2} n k_B \frac{T}{T_F} = \gamma T$ [Sommerfeld-Konstante γ]

[Jedoch auch Energie in Phononen: $c_p = c_v + AT^3$, $A = \text{const.}$ für $T \ll T_{\text{Debye}}$]

Elektrische Leitfähigkeit σ :

Def.: Stromflussflächendichte $\vec{J}_q = \sigma_q \vec{E}$, $q = \begin{cases} e^- & , \text{Elektron} \\ h & , \text{Loch} \end{cases}$, elektrisches Feld \vec{E} .

Nach Drude [klassisch, keine QM!] stoßen e^- mit Atomrümpfen $[m \frac{d\vec{v}}{dt} = -e\vec{E} - m \frac{\vec{v}_D}{\tau}]$, Driftgeschwindigkeit $\vec{v}_D = \vec{v} - \vec{v}_{\text{th}}$, Stoßzeit τ , so dass stationär $\vec{v}_D = -\frac{e\tau}{m} \vec{E} = -\mu \vec{E}$, Ladungsträgerbeweglichkeit μ . Dann $\vec{J}_{e^-} = -en_e \vec{v}_D$ [Ladungsträgergevolumentdichte n] und somit $\sigma_{e^-} = en_e \mu_{e^-}$.

Nach Sommerfeld [QM, e^- sind Fermionen mit Spin $\frac{1}{2}$] ist $\vec{v} = \frac{\hbar}{m}\vec{k}$, $\langle \vec{k}_0 \rangle$ der Gleichgewichtszustand [\Rightarrow kein Strom] und schließlich $\vec{J}_{e^-} = -\frac{en\hbar}{m} \underbrace{[\langle \vec{k} \rangle - \langle \vec{k}_0 \rangle]}_{\delta \vec{k}}$. Durch ein äußeres elektrisches Feld \vec{E} wird dann $\frac{d\langle \vec{k} \rangle}{dt} = \underbrace{-\frac{e}{\hbar}\vec{E}}_{\text{elektr. Feld}} + \underbrace{[-1]\frac{\delta \vec{k}}{\tau}}_{\text{Streuprozesse}}$

und im stationären Fall [$\frac{d\langle \vec{k} \rangle}{dt} = 0$] ergibt sich $\delta \vec{k} = -\frac{e}{\hbar}\tau \vec{E}$; entsprechend ist dann $\sigma = \frac{n_e e^2}{m} \tau$.

Aus der Stoßzeit τ bestimmte freie Weglängen [über v_{Fermi}] für Elektronen zeigen, dass Streuung nicht an Atomrümpfen sondern Phononen, strukturellen Defekten, Verunreinigungen oder Oberflächen stattfindet. I.e. wenige, schnelle Elektronen sorgen für den Ladungstransport.

Matthiessen-Regel: effektive Streuzeit τ_{ges} bei Einzelprozessen mit τ_i $\frac{1}{\tau_{\text{ges}}} = \sum_i \frac{1}{\tau_i}$.

Thermische Leitfähigkeit:

Wärmeflussdichte $\vec{J}_h = -\kappa \vec{\nabla} T$, thermische Leitfähigkeit $\kappa = \frac{1}{3} c_V v_{\text{Fermi}}^2 \tau$, Temperatur T .

Wiedemann-Franz-Gesetz [für Fermi-Gase]: $\frac{\kappa}{c_V} = \frac{\pi^2}{3} \left[\frac{k_B}{e} \right]^2 T$ $\left[\frac{\pi^2}{3} \left[\frac{k_B}{e} \right]^2 = 2,44 \cdot 10^{-8} \text{ W } \Omega \text{ K}^{-2} \right]$
für Metalle mit $T > 100 \text{ K}$ recht gut.]

Seebeck-Effekt: thermisch induzierte Spannung für einfache Metalle $\vec{E} = S \vec{\nabla} T$,
Seebeck-Koeffizient $S = -\frac{1}{3n_{e-e}} c_V \Rightarrow \text{typ. } \sim 1 \mu\text{V K}^{-1}$.

In einem äußeren **Magnetfeld** wirkt die Lorentzkraft [$\vec{F} = -e[\vec{E} + \frac{\hbar}{m} \delta \vec{k} \times \vec{B}]$], so dass sich die Stromflussdichte im stationären Zustand [o.B.d.A $\vec{B} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ B \end{pmatrix}$] zu Folgendem ergibt: $\vec{J}_{e^-} = \frac{\sigma_{e^-}}{1 + [\frac{\sigma_{e^-}}{n_{e-e}} B]^2} \begin{pmatrix} 1 & -\frac{\sigma_{e^-}}{n_{e-e}} B & 0 \\ \frac{\sigma_{e^-}}{n_{e-e}} B & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 + [\frac{\sigma_{e^-}}{n_{e-e}} B]^2 \end{pmatrix} \vec{E}$.
[\rightarrow Hall-Effekt]

Bei Einschränkung der Festkörper in mindestens einer Dimension auf unter die Fermi-Wellenlänge der Elektronen [„Quantum Confinement“: quantum well [2D], quantum wire [1D], quantum dot [0D]] ergeben sich potentiell diskrete Energiespektren [$E_{\text{ges}} = \sum_i \frac{\hbar^2}{2m} k_i^2 + \sum_j \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\pi^2}{L_j^2} n_j^2$ mit i kontinuierlich, j eingeschränkt, $n_j \in \mathbb{N}$].

[Auch Quantumwire kürzer der mittleren freien Weglänge weisen einen Widerstand auf: $R = \frac{1}{2} \frac{\hbar}{e^2}$, mit dem von-Klitzing-Widerstand $R_Q = 25812,807 \Omega$].

Dispersionsrelationen von Festkörpern [Energiebänder]:

Annahmen: idealer Kristall [Atomrumpfpotential $V(\vec{r}) = V(\vec{r} + \vec{R})$, \vec{R} beliebiger Realraum-Gittervektor], gegenseitig nicht beeinflussende Leitungselektronen. Quantenmechanisches Vielkörperproblem \Rightarrow Näherungen [quasi-freie e^- , quasi-gebundene e^-].

Bloch-Elektronen: aus obigen Annahmen folgerte Bloch, dass auch die Wellenfunktionen der Elektronen die Translationsymmetrie des Gitters erfüllen $\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} \underbrace{c_{\vec{k}-\vec{G}}}_{u_{\vec{k}}(\vec{r})} e^{-i\vec{G}\vec{r}} e^{i\vec{k}\vec{r}}$, mit $c_{\vec{k}} \in \mathbb{C}$, $u_{\vec{k}}(\vec{r}) = u_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R})$.

\vec{k} ist dabei nicht der Impuls des Elektrons, sondern nur eine Quantenzahl; sie heißt „Kristall-Impuls“!

Außerdem gilt $\Psi_{\vec{k}+\vec{G}}(\vec{r}) = \Psi_{\vec{k}}(\vec{r})$. Daher zur Beschreibung Beschränkung von \vec{k} auf die 1. Brillouin-Zone [dies heißt dann „reduziertes Zonenschema“]. \vec{k} ist jedoch physikalisch nicht beschränkt und zu jedem \vec{k} gehören mehrere Energieeigenwerte $E_n(\vec{k})$ [wobei auch $E_n(\vec{k} + \vec{G}) = E_n(\vec{k})$].

Geschwindigkeit der e^- $\vec{v}_n(\vec{k}) = \frac{1}{\hbar} \text{grad}_{\vec{k}}(E_n(\vec{k}))$.

Mit $\Psi^s \propto \cos(\vec{k}'\vec{r})$ und $\Psi^a \propto \sin(\vec{k}'\vec{r})$ erkennt man am Rand der 1. BZ [$\vec{k}' = \frac{1}{2}\vec{G}_{\min}$] in der Näherung [fast] freier Elektronen aufgrund des schwachen Potentials an den Orten hoher [Ψ^s] oder niedriger [Ψ^a] Aufenthaltswahrscheinlichkeit, dass die Energien $E_1^s(\vec{k}')$ und $E_1^a(\vec{k}')$ aufspalten [\rightarrow Bandlücke der Höhe $2V_{\vec{k}'}$ am Rand der 1. BZ / der 1. Bragg-Ebene].

Im tight-binding-Modell wird die Wellenfunktion als Linearkombination von Atomorbitalen [LCAO] beschrieben und deren Energie im effektiven Potential des FKs berechnet.

In beiden Näherungen entstehen im reduzierten Zonenschema Bänder, i.e. $E_n(\vec{k})$ ist nach oben und unten beschränkt $\forall \vec{k}$ und die obere/untere Grenze ist kleiner/größer als die untere/obere Grenze von E_{n+1}/E_{n-1} .

[Bessere Modelle unter Berücksichtigung von Coulomb-WW der Leitungs-Elektronen, Spin-Bahn-Kopplung, ...]

Effektive Masse $m^*(\vec{k}) = \frac{\hbar^2}{\frac{d^2E}{dk^2}}$ [entspricht Parabelnäherung mit lokal [$\Rightarrow \vec{k} \approx \vec{k}^*$] $E_n(\vec{k}) \approx \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m^*(\vec{k}^*)}$.]

Valenzband [VB]: energetisch oberstes Band, welches auch bei $T = 0\text{ K}$ e^- enthält.

Leitungsband [LB]: energetisch niedrigstes Band, welches bei $T = 0\text{ K}$ komplett leer ist.

Bandlücke [Gap]: geringster energetischer Abstand zwischen LB und VB in Halbleitern [$E_{\text{gap}} \sim 1\text{ eV} \dots 3\text{ eV}$] und Isolatoren [$E_{\text{gap}} \sim 6\text{ eV}$].

Halbleiter/Isolator: E_F zwischen VB und LB Metall: E_F im LB Halbmetall: E_F in VB und LB
[Halbmetall: Bandüberlapp durch Anisotropie]

Halbleiter sind bei $T = 0\text{ K}$ perfekte Isolatoren.

Dynamik von Kristallelektronen:

Für ein semiklassisches Modell ohne Berücksichtigung von Streuprozessen [\Rightarrow Energie-Band unverändert] ergibt sich für die Elektronen in einem nicht vollständig gefüllten Band [vollständig gefüllt \Rightarrow keine Stromleitung] die Bewegungsgleichung

$$\hbar \frac{\partial \vec{k}}{\partial t} = -e[\vec{E} + \vec{v}_{e^-} \times \vec{B}].$$

Statt der besetzten Zustände [Elektronen] kann man sich auch die unbesetzten Zustände unter dem Einfluss externer Felder betrachten \Rightarrow Löcher / Defektelektronen . Es gilt $\vec{k}_h = -\vec{k}_{e^-}$, $E_h(\vec{k}) = -E_{e^-}(\vec{k})$, $m_h^* = -m_{e^-}^*$, $\vec{v}_h = \vec{v}_{e^-}$.

[\vec{k} bei Bloch-Wellen ist einzig eine Quantenzahl / ein Quasi-Impuls!]