

Metal

Semimetal

*p*-type

Semiconductor

intrin.

*n*-type

Insulator

# Festkörper 2

Chemische Bindung  
 Fermi-Dirac Verteilung  
 Halbleiter  
 Quantum-Halleffekt  
 Supraleitung

Thema Festkörper  
**Chemische Bindung**



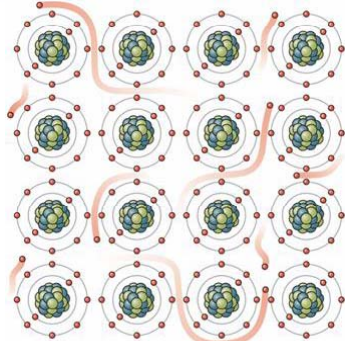
**CHEMICAL BONDS**

METALLIC, IONIC, AND COVALENT BONDS



# Coulomb vs Quantum Bindungstypen

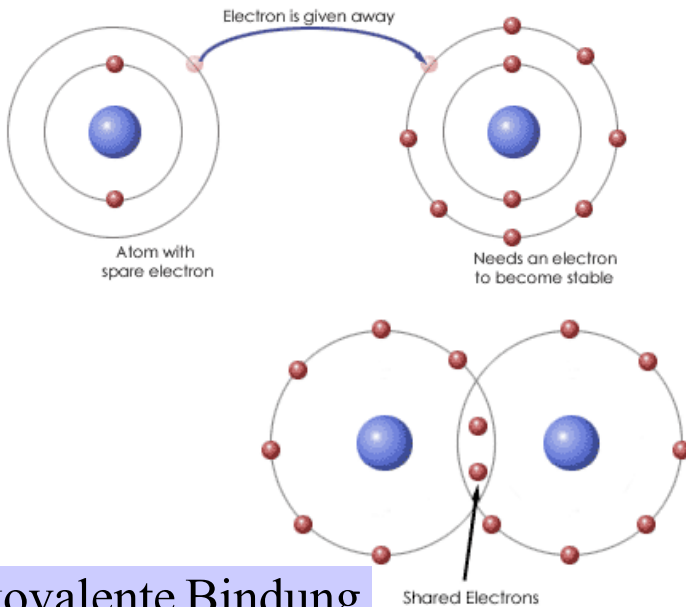
## metallisch



Copyright © 2006 Pearson Prentice Hall, Inc.

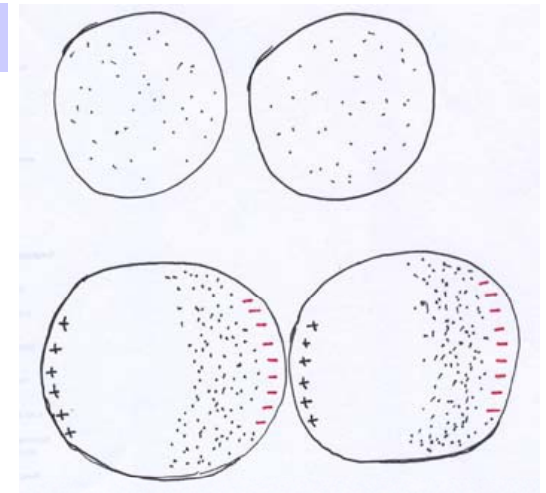
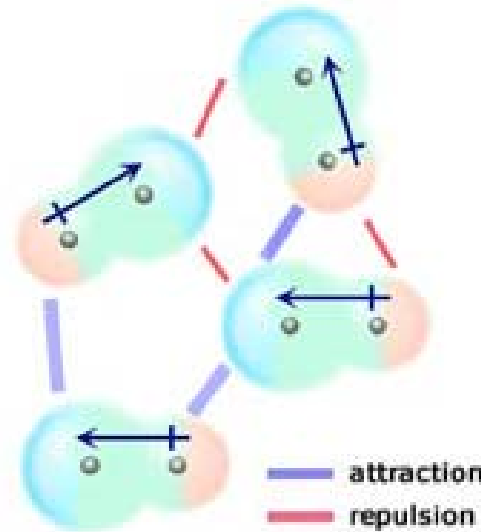
Typ	Mechanismus	typische Bindungsenergie pro Atom oder pro Molekül
ionisch	Transfer von Elektronen	5 eV
kovalent	Elektronen - Sharing	10 eV
metallisch	delokalisierte Elektronen	3 eV
polar (Dipol)	Anziehung von molekularen Dipolen	0.4 eV
van der Waals	Korrelationen in der Elektronenverteilung	0.1 eV

## ionische Bindung



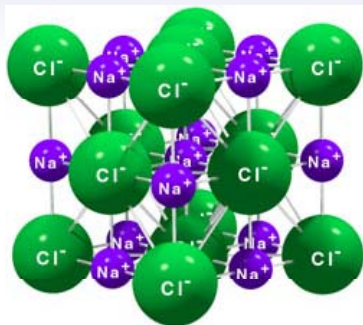
## kovalente Bindung

## Dipol - Dipol Wechselwirkung



## induzierte Dipol-Dipol Wechselwirkung van der Waals

# Coulombwechselwirkung Natriumchlorid



## Symptome

- im NaCl-Kristall sind die Atomabstände etwas größer als im Molekül
- JEDES Natriumatom spürt
  - Coulomb-Anziehung von sechs Cl-Anionen
  - Coulomb-Abstoßung zwölf Na-Ionen
  - Coulomb-Anziehung von acht Cl-Anionen

Bindungsabstand  
 $R_{\text{NaCl}}^{\text{FK}} = 0.28 \text{ nm}$

(a)... und so weiter

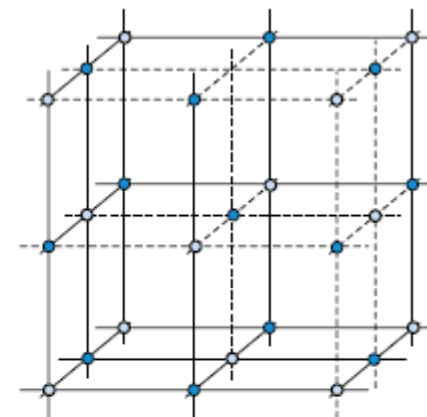
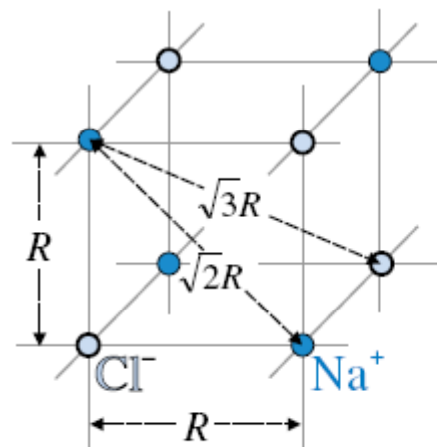
(b)

Abstand zum nächsten Na-Atom

$$\sqrt{R^2 + R^2} = \sqrt{2}R$$

Abstand zum übernächsten Cl-Atom

$$\sqrt{R^2 + R^2 + R^2} = \sqrt{3}R$$



Superposition aller Coulombbeiträge

$$E_{\text{total}} = -6 \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{R} + 12 \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{\sqrt{2}R} - 8 \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{\sqrt{3}R} + \dots \approx - \underset{\substack{\text{Madelung Konstante} \\ \text{genannt}}}{1.7476} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{R}$$

anziehend
abstoßend
anziehend

## Diagnose

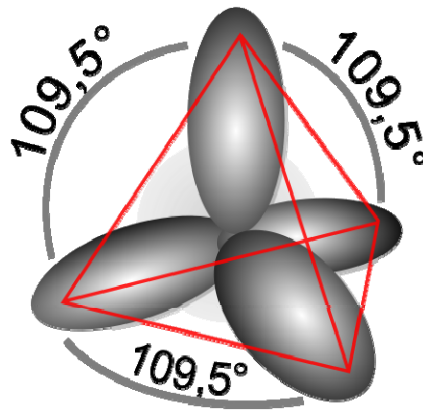
- für NaCl ( $R=0.28 \text{ nm}$ ) ergibt sich Wert von 4.5 eV ( $E_{\text{total}} = -9 \text{ eV}$ ) deutlich höher als  $kT$  (20 meV)
- hoher Schmelzpunkt (NaCl 528K) und guter elektrischer Isolator

# Festkörper Kovalente Bindung

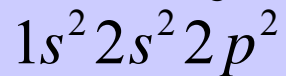
## Symptome

- kovalente Bindung beinhaltet Paarung von Elektronen mit entgegengesetztem Spin
- Elektronen stammen aus nur teilweise besetzten Schalen
- jedes Atom trägt über ein Elektron zu Bindung bei
- für Bindungszustand müssen Elektronendichteverteilungen überlappen
- p-Orbitale sind stark ausgerichtet und führen zu charakteristischen Kristallstrukturen

Bindungstyp in Kohlenstoffverbund  
 $sp^3$  – Hybridisierung

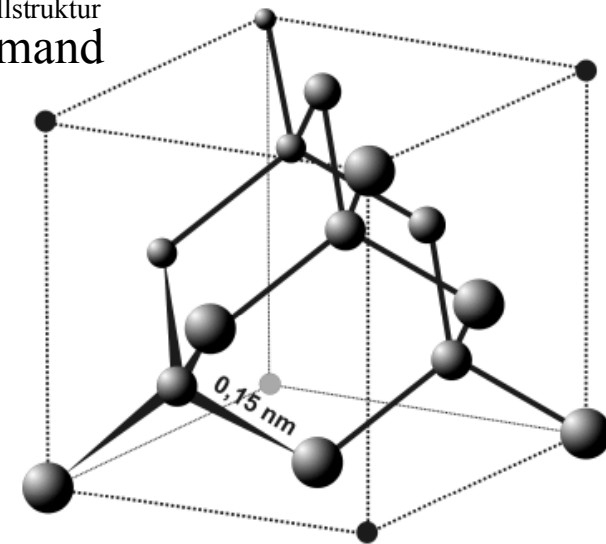


Elektronenkonfiguration



in atomarem Kohlenstoff

Kristallstruktur  
Diamant



## Diagnose

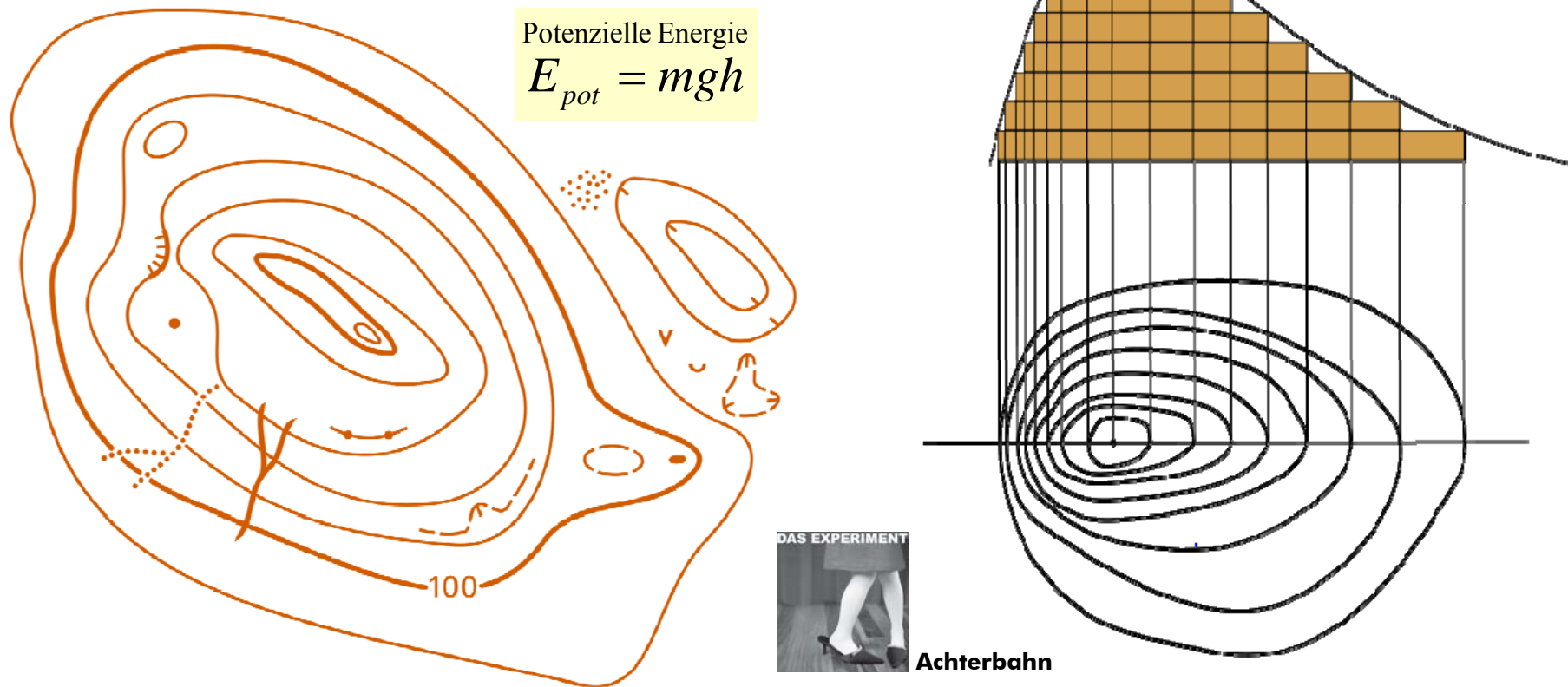
- interessant sind die Elemente der 4. Hauptgruppe
- Kohlenstoff, Silizium, Germanium haben Wertigkeit VIER in äußerer p-Schale
- aufgrund ähnlicher Bindungsenergien tragen alle s- und p-Elektronen zur Bindung bei
- Elektronendichteverteilung in Kohlenstoff führt zu Diamantstruktur im Festkörper

# Isolinien Landkarte



## Symptome

- Höhenlinien oder Niveaulinien bezeichnen auf Landkarten benachbarte Punkte gleicher Höhe
- jeder Höhenlinie kann EIN bestimmter Wert der potenziellen Energie zugeordnet werden

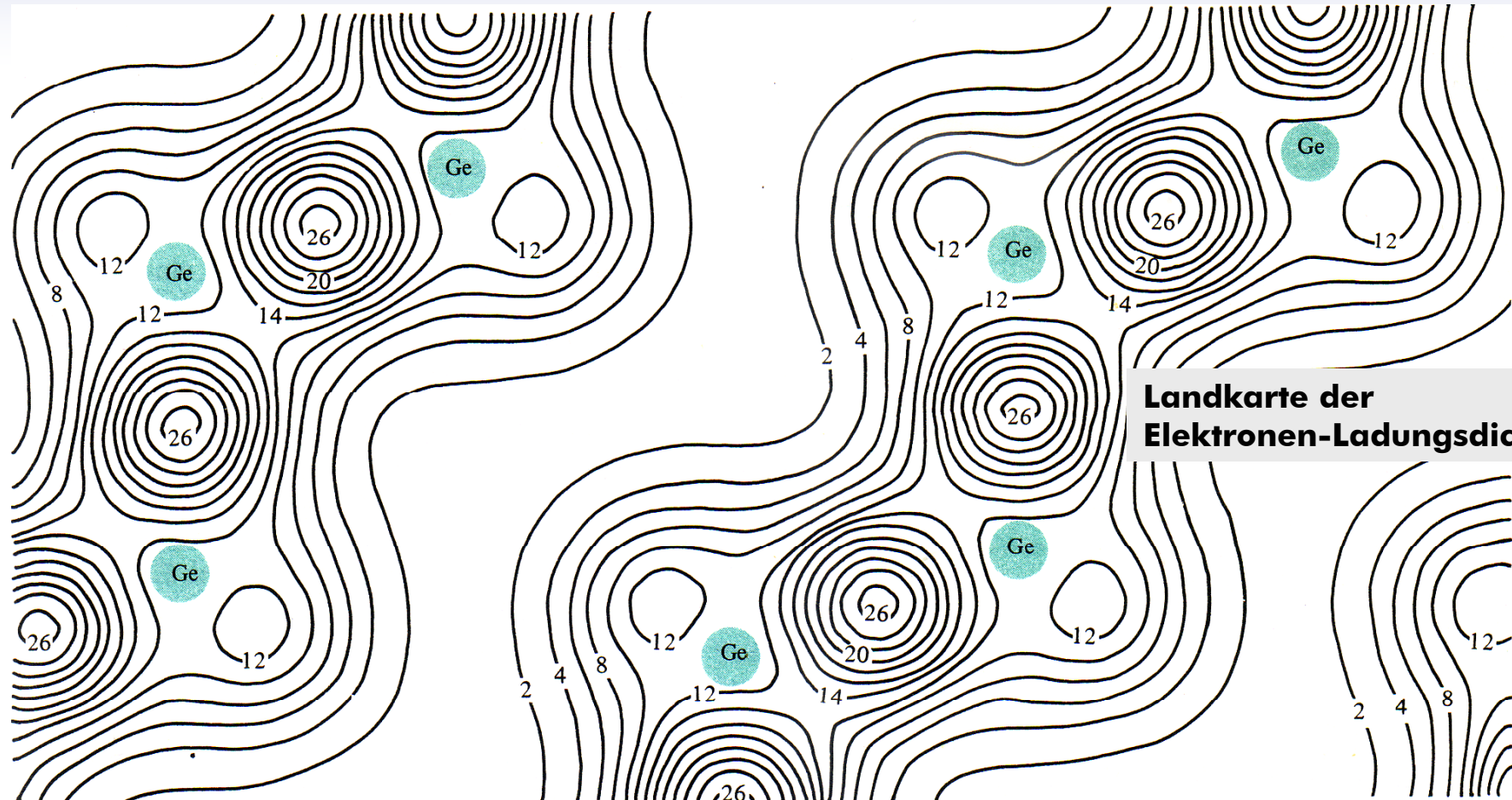


## Diagnose

Auf einer Isolinie ändert sich der Wert physikalischen Größe nicht

# kovalente Bindung

## Germanium im Grundzustand



Landkarte der  
Elektronen-Ladungsdichte

### Diagnose

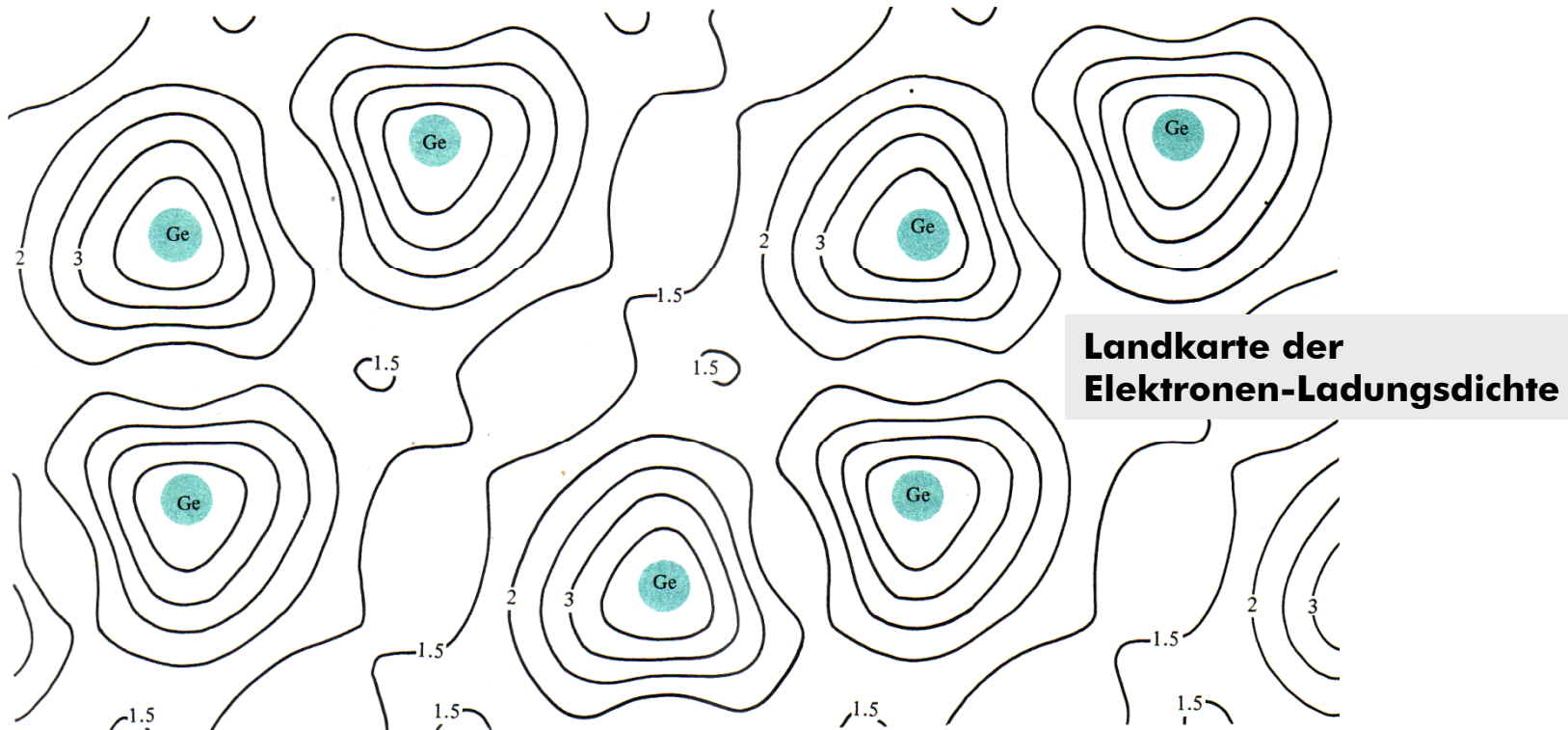
- Elektronen-Ladungsdichte variiert im Grundzustand um etwa Faktor **DREISSIG**
- Minima der Ladungsdichte im Bereich der Atomrümpfe
- Elektronen-Ladungsdichte variiert stark (2 – 26 in willkürlichen Einheiten)
- typische Verhältnisse für kovalente Bindung

# Metallische Bindung

## Germanium im angeregten Zustand

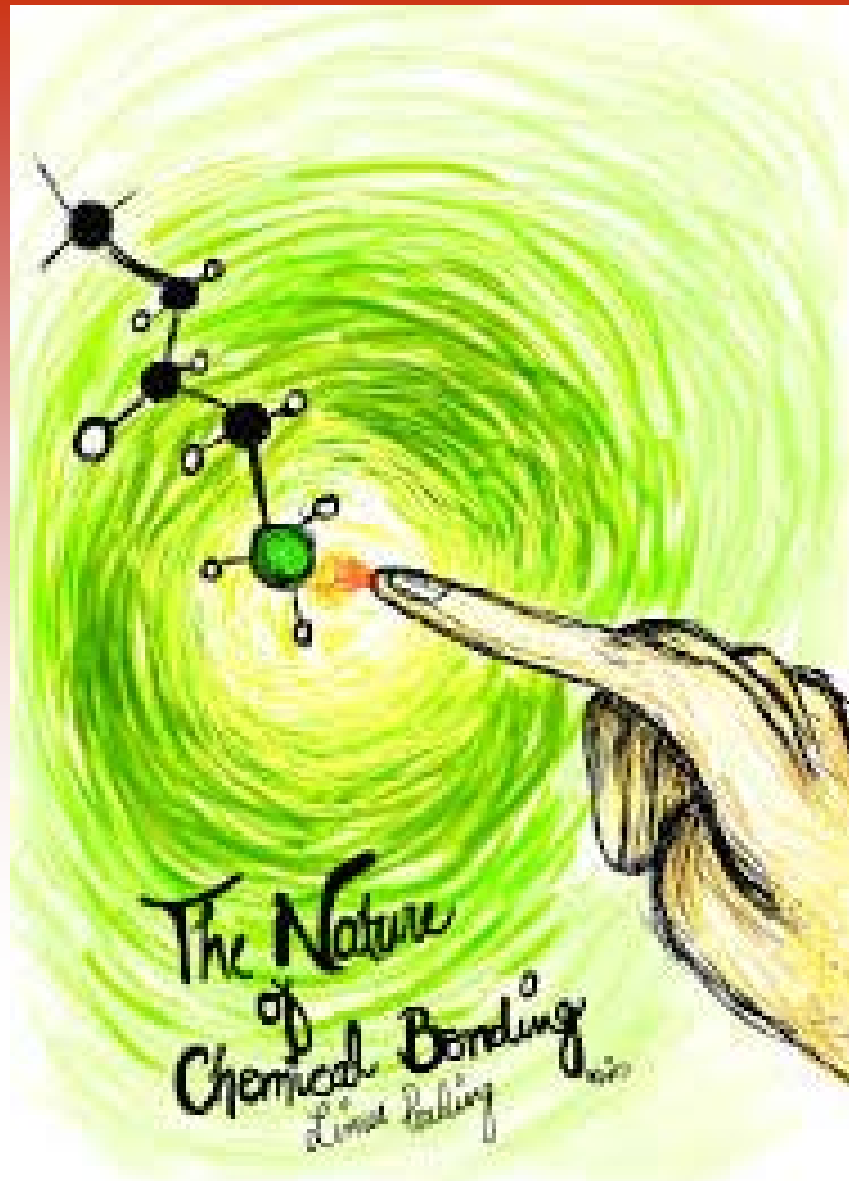
### Symptome

- Anregung von Elektronen in höheres Energieniveau dehnt Wellenfunktion aus
- Anziehung von Elektron durch Nachbaratom delokalisiert Wellenfunktion
- Phänomen setzt sich über ganzen Kristall fort
- erhöhte Aufenthaltswahrscheinlichkeit delocalisierter Elektronen in Kernnähe

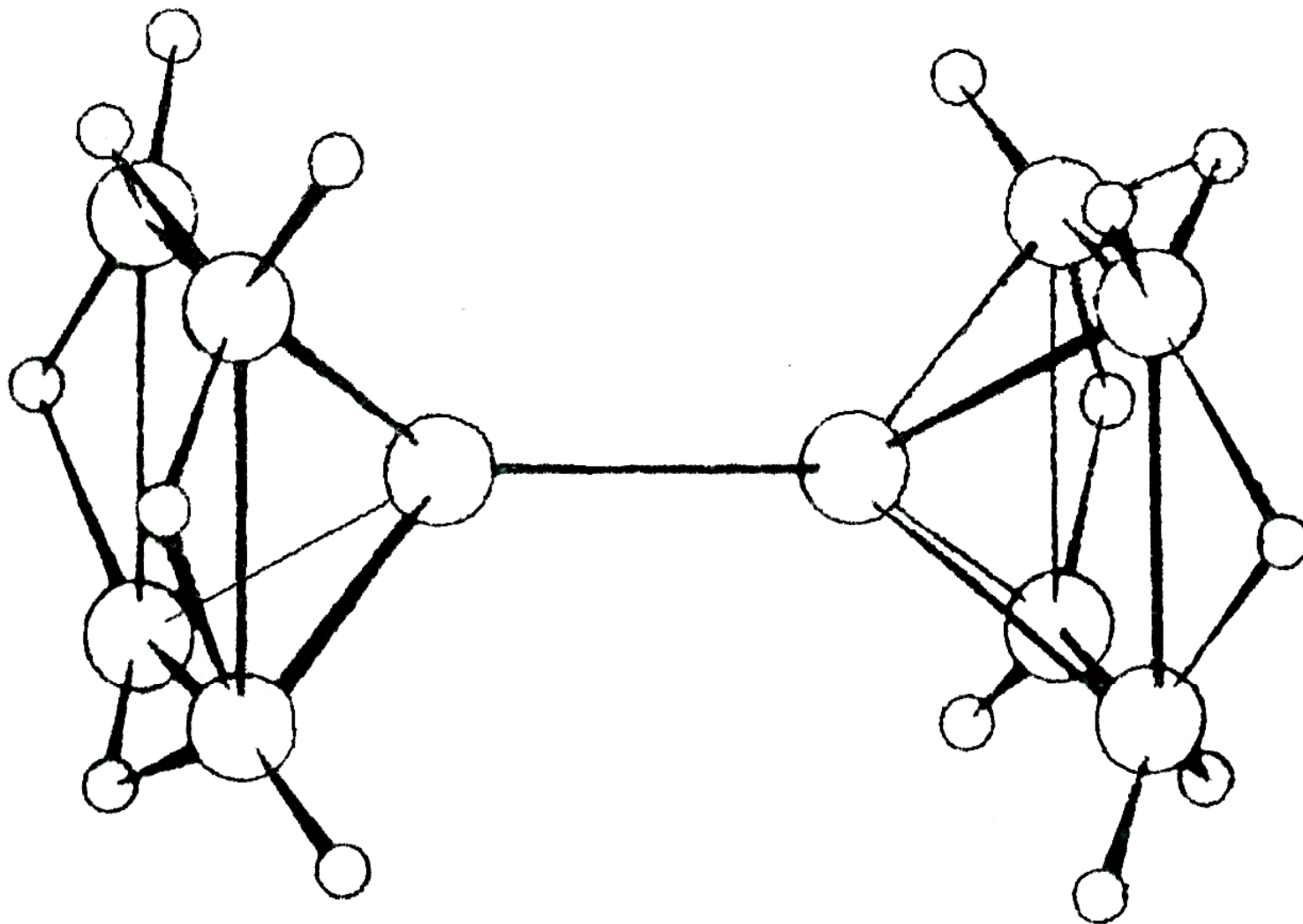


### Diagnose

- Minima der Elektronen-Ladungsdichte jetzt **ZWISCHEN** den Atomrümpfen
- Elektronen-Ladungsdichte variiert im angeregten Zustand nur wenig um Faktor **DREI**
- Elektronendichte verschmiert über Kristall
- Elektronen sind dadurch aber jetzt nahezu frei beweglich (metallisch leitend)



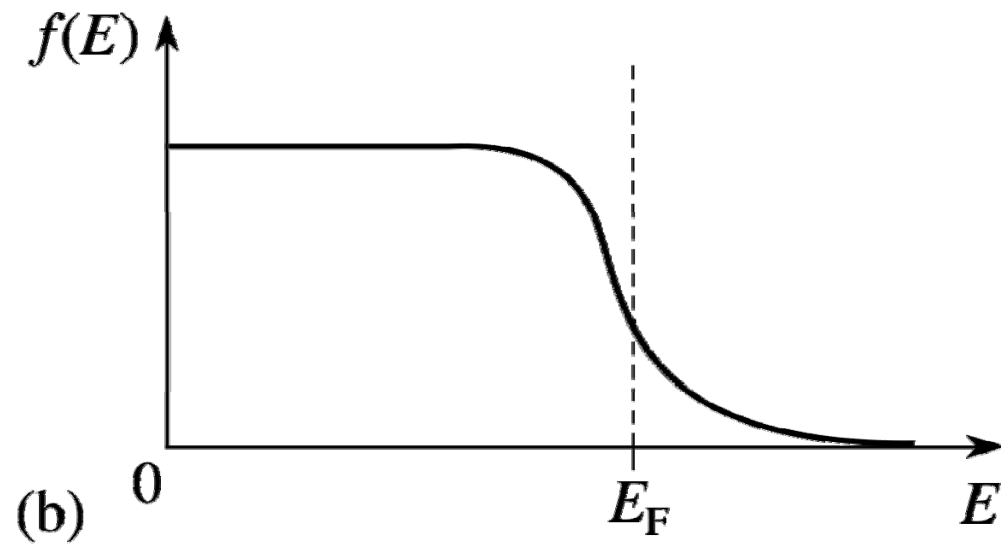
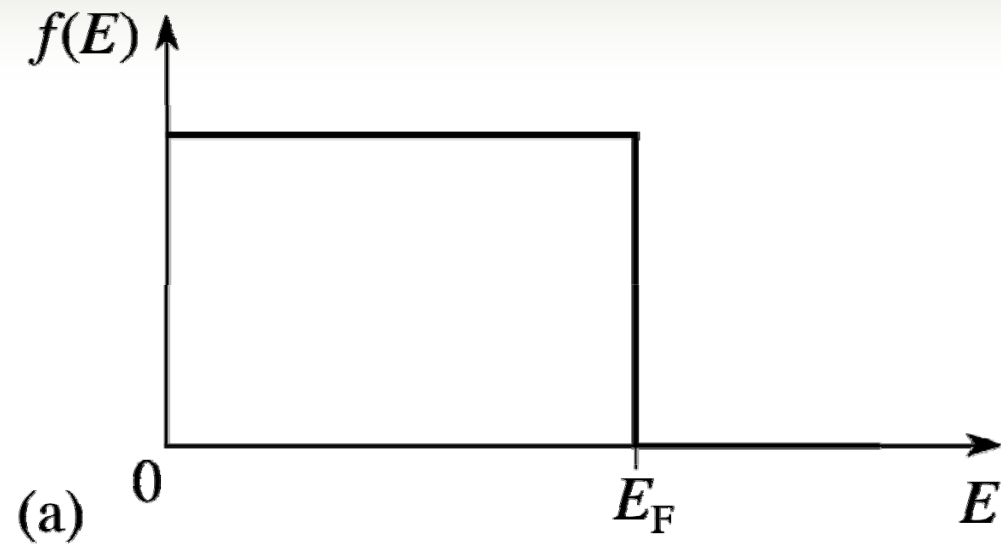
**The Nobel Prize in Chemistry 1954 was awarded to Linus Pauling for his research into the nature of the chemical bond and its application to the elucidation of the structure of complex substances**



**The Nobel Prize in Chemistry 1976 was awarded to William Lipscomb for his studies on the structure of boranes illuminating problems of chemical bonding**

# Thema Festkörper

## Fermi-Dirac Verteilung



# klassisch betrachtet – das freie Elektronengas Drudemodell



## Symptome

- schwach gebundene Valenzelektronen im Festkörper sind frei beweglich
- Coulombanziehung durch Ionenrümpfe nahezu konstant über gesamten Festkörper
- Elektronen verhalten sich wie klassisches Gas, beschrieben durch Maxwell-Boltzmann

elektrische Strom

$$I_e = \vec{j}_e A_0$$

Dimensionsanalyse

$$[j_e] = \left[ \frac{\text{A}}{\text{m}^2} \right]$$

Ohmsches Gesetz ( $U_e = I_e \cdot R_e$ )

elektrische Stromdichte  $\vec{j}_e$  = elektrische Leitfähigkeit  $\sigma_e$  elektrisches Feld  $\vec{E}_e$

$$\vec{j}_e = \sigma_e \vec{E}_e$$

Dimensionsanalyse

$$[E_e] = \left[ \frac{\text{V}}{\text{m}} \right]$$

Dimensionsanalyse

$$[\sigma_e] = \left[ \frac{1}{\Omega\text{m}} \right]$$

klassisch erwartete Abhängigkeit der elektrischen Leitfähigkeit von der Temperatur

$$\sigma_e \approx \frac{1}{\sqrt{T_K}}$$

experimentell tatsächlich beobachtete Abhängigkeit

$$\sigma_e \approx \frac{1}{T_K}$$

**Paul Drude**  
1863-1906



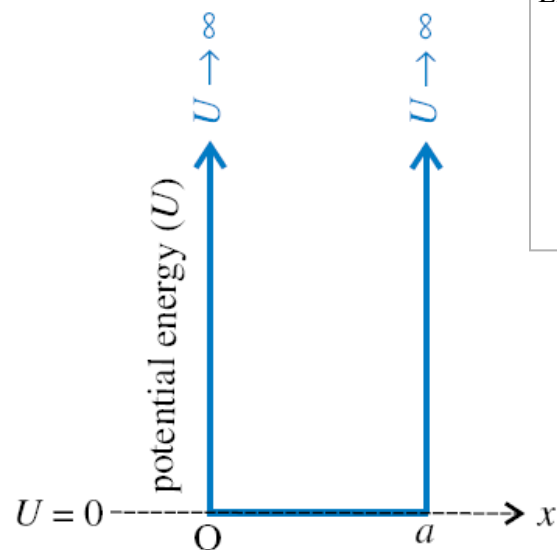
## Diagnose

- Driftgeschwindigkeit durch Wechselwirkung mit Ionenrümpfen konstant (viskose Reibung)
- Analyse ergibt mittlere freie Weglänge in Größenordnung 10-facher Abstand der Atome
- Temperaturabhängigkeit des Widerstandes wird **FALSCH** vorhergesagt
- Elektronen liefern **KEINEN** Beitrag zur molaren spezifischen Wärmekapazität
- klassische Theorie kann Leitfähigkeit in Metallen nicht erklären
- erst Quantenphysik liefert richtige Erklärung für geringen Beitrag Elektronen

# quantenmechanisch betrachtet Freies Elektronengas

## Symptome

- bei  $T=0\text{K}$  haben nach Maxwell-Boltzmann Statistik alle Elektronen dieselbe Energie ( $E=0$ )
- Aussage steht im Widerspruch zum Pauliprinzip (kein Elektron kann selben Zustand besetzen)



Energiezustände im 1-dimensionalen unendlich hohen Potenzialwall

$$E_n^{1D}(x) = E_1^{1D} \cdot n_{QW}^2$$

$$\text{wobei } E_1^{1D} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_e a^2}$$

one  
DIMENSIONAL

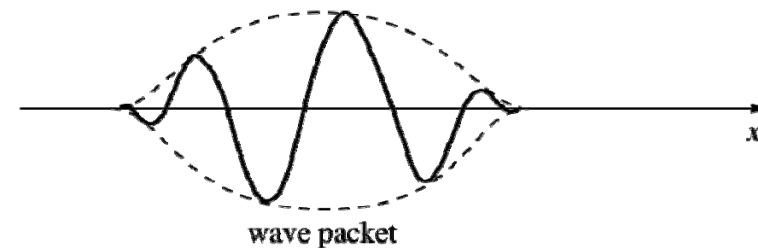
Lösung für Wellenfunktion in 1-dimensionaler Schrödingergleichung

$$\psi_{1D}(x) = A_{1D} \sin k_{1D} x$$

$$\text{wobei } k_{1D} = \sqrt{\frac{2m_e E}{\hbar^2}} = \sqrt{\frac{2m_e}{\hbar^2} \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_e a^2}} = \sqrt{\frac{\pi^2}{a^2}}$$

3-dimensionale stationäre Schrödingergleichung für freies Teilchen

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \left( \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right) = E_{QW}^{3D} \psi$$



## Diagnose

**Unendlich hoher 1D-Potenzialtopf muss für Festkörper auf DREI Dimensionen erweitert werden**

# quantenmechanisch betrachtet freies Elektronenmodell

Produktansatz für Wellenfunktion

$$\psi(x, y, z) = \psi_1(x)\psi_2(y)\psi_3(z)$$

3-dimensionale Schrödingergleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \left( \psi_2\psi_3 \frac{d^2\psi_1}{dx^2} + \psi_1\psi_3 \frac{d^2\psi_2}{dy^2} + \psi_1\psi_2 \frac{d^2\psi_3}{dz^2} \right) = E\psi_1\psi_2\psi_3$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \left( \frac{1}{\psi_1} \frac{d^2\psi_1}{dx^2} + \frac{1}{\psi_2} \frac{d^2\psi_2}{dy^2} + \frac{1}{\psi_3} \frac{d^2\psi_3}{dz^2} \right) = E$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \left( \frac{1}{\psi_1} \frac{d^2\psi_1}{dx^2} \right) = E + \frac{\hbar^2}{2m_e} \left( \frac{1}{\psi_2} \frac{d^2\psi_2}{dy^2} + \frac{1}{\psi_3} \frac{d^2\psi_3}{dz^2} \right)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \left( \frac{1}{\psi_1} \frac{d^2\psi_1}{dx^2} \right) = C_1\psi_1$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \left( \frac{1}{\psi_2} \frac{d^2\psi_2}{dy^2} \right) = C_2\psi_2$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \left( \frac{1}{\psi_3} \frac{d^2\psi_3}{dz^2} \right) = C_3\psi_3$$

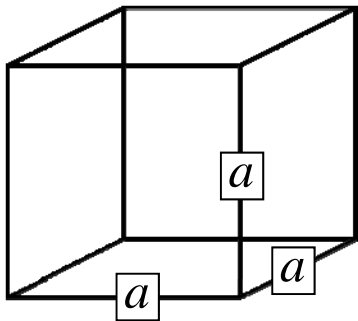
## Diagnose

- Produktansatz führt auf drei unabhängige Differentialgleichungen
- Lösung für jede Raumrichtung ist jeweils Sinusfunktion

# quantenmechanisch betrachtet freies Elektronenmodell

Lösung für 3-dimensionale Schrödingergleichung analog zu 1-dimensionalen Potenzialtopf

$$\psi(x, y, z) = A_{3D} (\sin k_1 x) (\sin k_2 y) (\sin k_3 z)$$

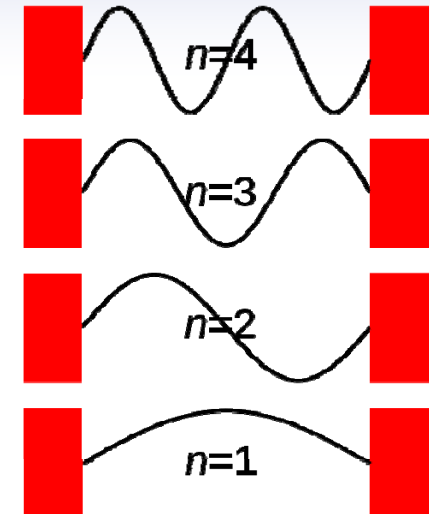


Randbedingung (Boxgröße  $a \cdot a \cdot a$ ) ergibt

$$k_1 = \frac{n_1 \pi}{a} \quad k_2 = \frac{n_2 \pi}{a} \quad k_3 = \frac{n_3 \pi}{a} \quad \text{mit } n_i = 1, 2, 3, \dots$$

$$E_{n_1, n_2, n_3} = E_1 (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2) \quad \text{mit } E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_e a^2}$$

pro Freiheitsgrad gibt es eine Quantenzahl, die mögliche Energieniveaus festlegt



## Energiezustand (111)

- niedrigster Energiezustand ist  $(n_1=1, n_2=1, n_3=1)=(111)$
- zugehörige Energie ist  $3E_1$
- aufgrund zwei möglicher Einstellungen des Spins Besetzung mit 2 Elektronen (Pauli-Prinzip)

## Energiezustand (211)

- nächst höherer Energiezustand ist  $E_1(2^2+1^2+1^2)=6E_1$
- (121) und (112) haben dieselbe Energie (DREI Energiezustände)
- Spinzustand ergibt Besetzung des Zustandes mit sechs Elektronen

## Energiezustand (221)

- nächst höherer Energiezustand ist  $E_1(2^2+2^2+1^2)=9E_1$
- (122) und (212) haben dieselbe Energie (DREI Energiezustände)
- Spinzustand ergibt Besetzung des Zustandes mit sechs Elektronen

# 40 Elektronen nach Pauli einfüllen

## Besetzungszahl



Zustand ( $n_1, n_2, n_3$ )	Bindungsenergie $E_1(n_1^2 + n_2^2 + n_3^2)$	Besetzung	Anzahl Elektronen in noch nicht besetzten Niveaus
(111)	$3E_1$	2	(frei) $38 = 40 - 2$ (besetzt)
(211), (121), (112)	$6E_1$	6	(frei) $32 = 40 - 8$ (besetzt)
(221), (212), (122)	$9E_1$	6	(frei) $26 = 40 - 14$ (besetzt)
(311), (131), (113)	$11E_1$	6	(frei) $20 = 40 - 20$ (besetzt)
(222)	$12E_1$	2	(frei) $18 = 40 - 22$ (besetzt)
(321), (312), (213), (231), (123), (132)	$14E_1$	12	(frei) $6 = 40 - 34$ (besetzt)
(322)	$17E_1$	6	(frei) $0 = 40 - 40$ (besetzt)

### Diagnose

- bei  $T=0K$  sind Niveaus bis zu einer Energie von  $17E_1$  voll mit Elektronen besetzt
- Elektronen müssen nach Pauli immer höhere Energieniveaus besetzen
- Bindungsenergie nimmt als Funktion der Elektronenanzahl endlichen Wert an

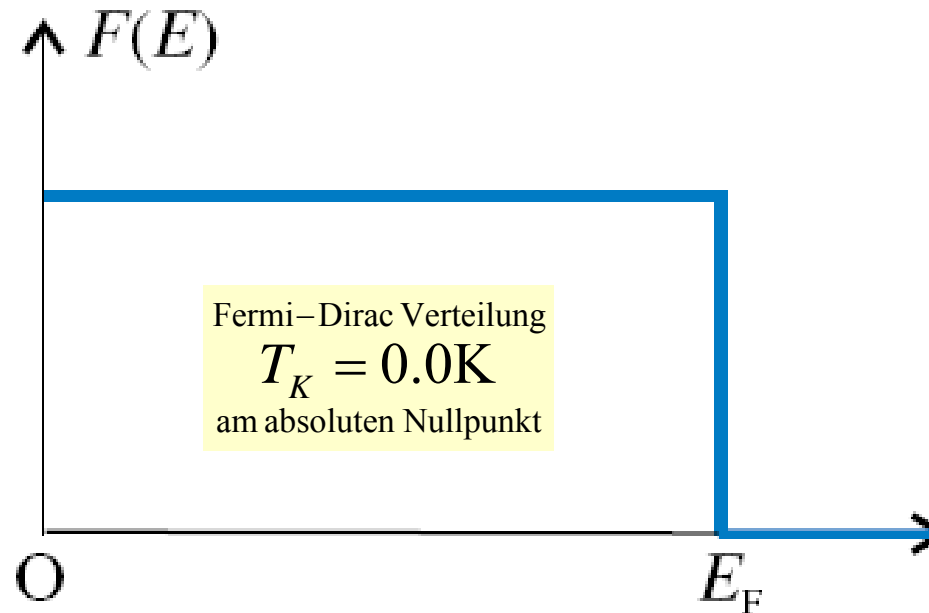
# $10^{23}$ Festkörperelektronen nach Pauli einfüllen

## Fermi-Energie



Fermi-Dirac-Verteilung am absoluten Nullpunkt

$$F_{\text{Fermi-Dirac}}(E) = \begin{cases} 1 & \text{wenn } E \leq E_F \\ 0 & \text{wenn } E > E_F \end{cases}$$

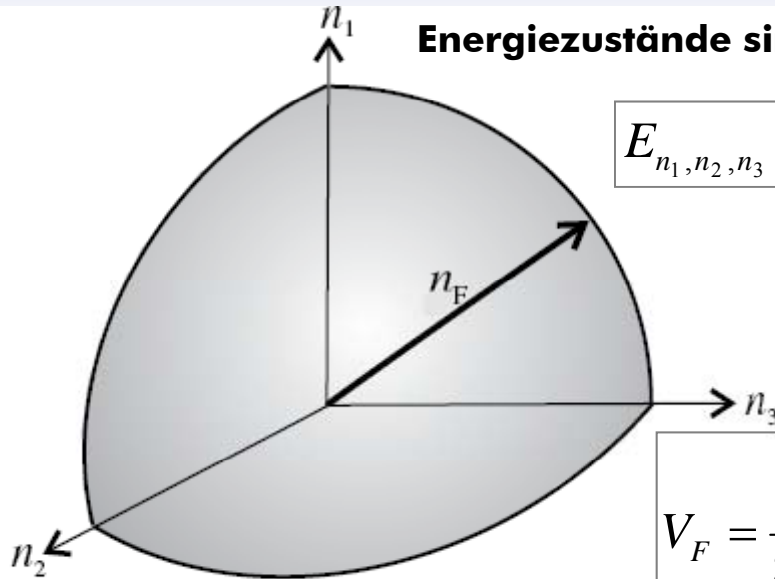


### Diagnose

- höchste Energie, die bei  $T=0K$  im FK mit Elektronen besetzt wird, nennt man Fermi-Energie
- KLASSISCH hätten alle Elektronen bei  $T=0K$  eine Energie von  $3/2 kT$  ALSO NULL
- es ergibt sich quantenphysikalisch UNTERSCHIED zu Maxwell-Boltzmann Statistik für ein Gas

# Energieverteilung bei $10^{28}$ Elektronen pro $m^3$ $T=0K$

Energiezustände sind im positiven Oktanten besetzt bis zum Radius  $n_F$



$$E_{n_1, n_2, n_3} = E_1 (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2) = E_1 n^2$$

Beispiel  
 $n = \sqrt{3}$  für (111)

besetzte Zustände bei 0K  
 $E_F(T_K = 0K) = E_1 n_F^2$

Volumen des Oktanten  
 $V_F = \frac{1}{8} \left( \frac{4}{3} \pi n_F^3 \right) = \frac{1}{6} \pi n_F^3$

**Volumen der Fermi-Kugel**

## 1. Spinzustand der Elektronen

Anzahl Elektronen im Oktanten  
 $N_{electrons} = 2 \cdot \frac{1}{6} \pi n_F^3 = \frac{1}{3} \pi n_F^3$

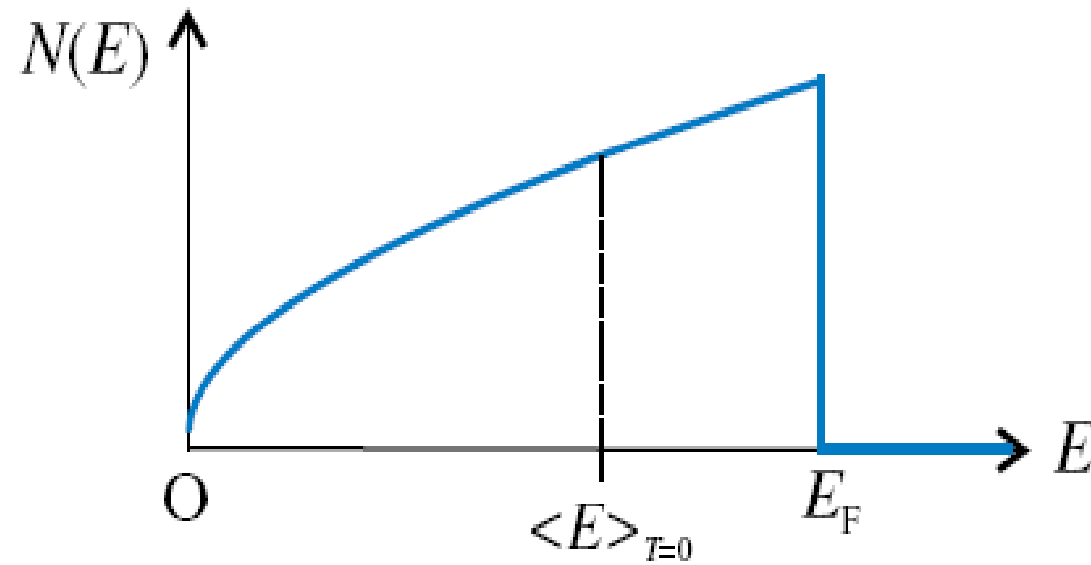
## 2. Anzahl der Elektronen

Anzahl Elektronen aus Elektronendichte  
 $N_{electrons} = n_{electrons} a^3$

Fermi-Niveau bei  $T_K = 0.0 K$   
 $n_{electrons} a^3 = \frac{1}{3} \pi n_F^3$

$$n_F = \left( \frac{3 n_{electrons} a^3}{\pi} \right)^{1/3}$$

# Elektronen-Energieverteilung $T=0\text{K}$

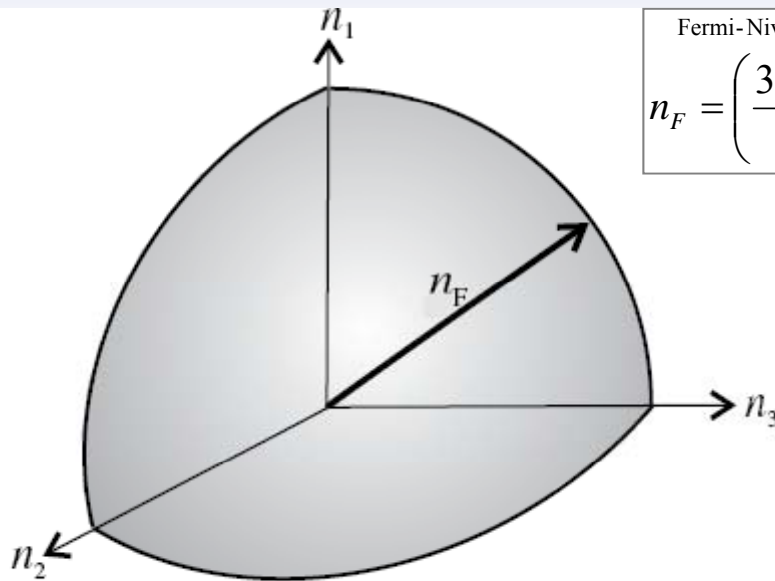


**Diagnose**

**Anzahl der Elektronen, die Energiezustände bis zur Fermi-Energie besetzen**

# Energieverteilung bei $10^{28}$ Elektronen pro $m^3$

## T=0K



Fermi-Niveau bei  $T_K = 0.0$  K

$$n_F = \left( \frac{3n_{\text{electrons}} a^3}{\pi} \right)^{1/3}$$

besetzte Zustände bei  $T_K = 0.0$  K

$$E_F(T_K = 0K) = E_1 n_F^2$$

$$E_F(T_K = 0K) = E_1 \left( \frac{3n_e a^3}{\pi} \right)^{2/3}$$

$$E_F(T_K = 0K) = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_e a^2} \left( \frac{3n_e a^3}{\pi} \right)^{2/3}$$

Fermi - Energie bei  $T_K = 0.0$  K

$$E_F(T_K = 0K) = \frac{\hbar^2}{2m_e} (3\pi^2 n_e)^{2/3}$$

### Diagnose

- Herleitung erfolgte für Elektronen im Kasten mit bestimmten Abmessungen
- Ergebnis kann allgemein angewendet werden

Fermi-Energie bei  $T_K = 0.0$  K für Kupfer ( $n_e = 8.4 \cdot 10^{28} \text{ m}^{-3}$ )

$$E_F(0K) \approx 7 \text{ eV}$$

$$\Delta E \approx 10^{-14} \text{ eV}$$

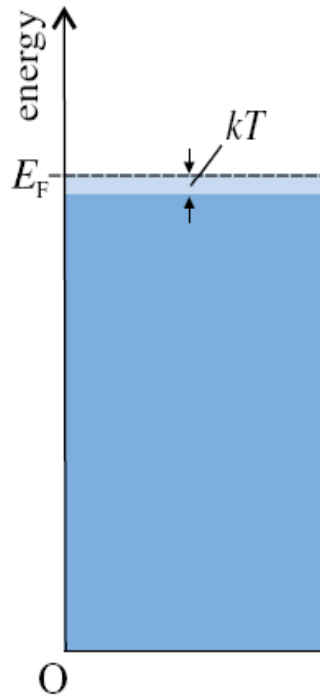
quasikontinuierlich

# Elektronenenergien bei endlichen Temperaturen

## Fermi-Dirac Statistik

### Symptome

Nur Elektronen nahe der Fermi-Energie können bei Temperaturerhöhung in höhere, unbesetzte Energiezustände angeregt werden



Fermi-Dirac Verteilung

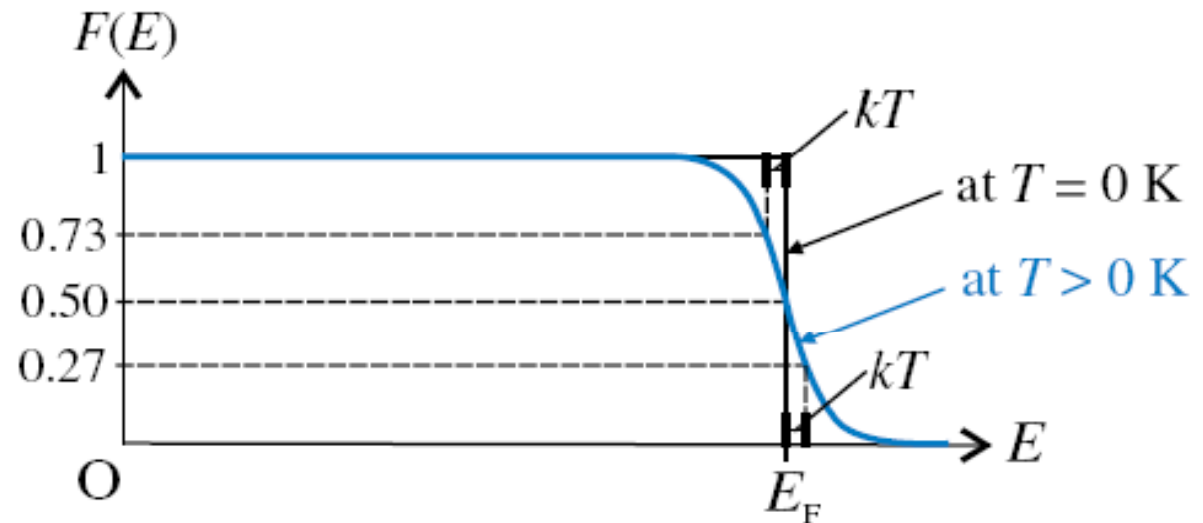
$$F_{FD}(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E - E_F}{k_B T_K}\right) + 1}$$

bei  $T_K \neq 0.0 \text{ K}$

klassisch  
Dulong-Petit

quantenmechanisch

$$c_V = 3R_G \rightarrow c_V = \frac{3k_B T_K R_G}{E_F}$$



### Diagnose

- Pauliprinzip erklärt, warum nur geringer Anteil der Elektronen zur Wärmekapazität beiträgt
- Fermi-Dirac Verteilung führt zu modifizierter Dulong-Petite Regel

# Verteilungsfunktion klassisch vs quantum Maxwell oder Bose oder Fermi

## Symptome

- Wert der Fermi-Dirac Verteilung ist für alle Temperaturen geringer als Wert Bose-Verteilung
- mathematisch liegt dies am Faktor (+1 Fermi) im Vergleich zu (-1 Bose) in Verteilungsfunktion
- physikalische Ursache ist, dass Bosonen nicht wie Fermionen dem Pauliprinzip gehorchen
- Bosonen können niedrig liegende Zustände ohne Einschränkung besetzen

Fermi-Dirac Verteilung

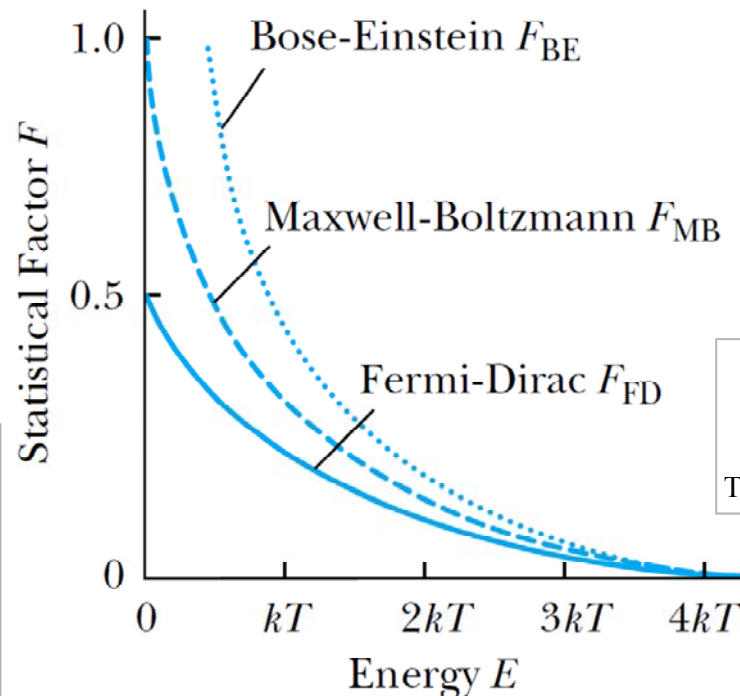
$$F_{FD}(E) = \frac{1}{\exp(\beta E) + 1}$$

für Spin=1/2 Teilchen (Fermionen)  
Teilchen sind identisch und ununterscheidbar

Bose-Einstein Verteilung

$$F_{BE}(E) \sim \frac{1}{\exp(\beta E) - 1}$$

für Spin=1 Teilchen (Bosonen)  
Teilchen sind identisch und ununterscheidbar  
Bosonen klumpen stärker als klassische Teilchen

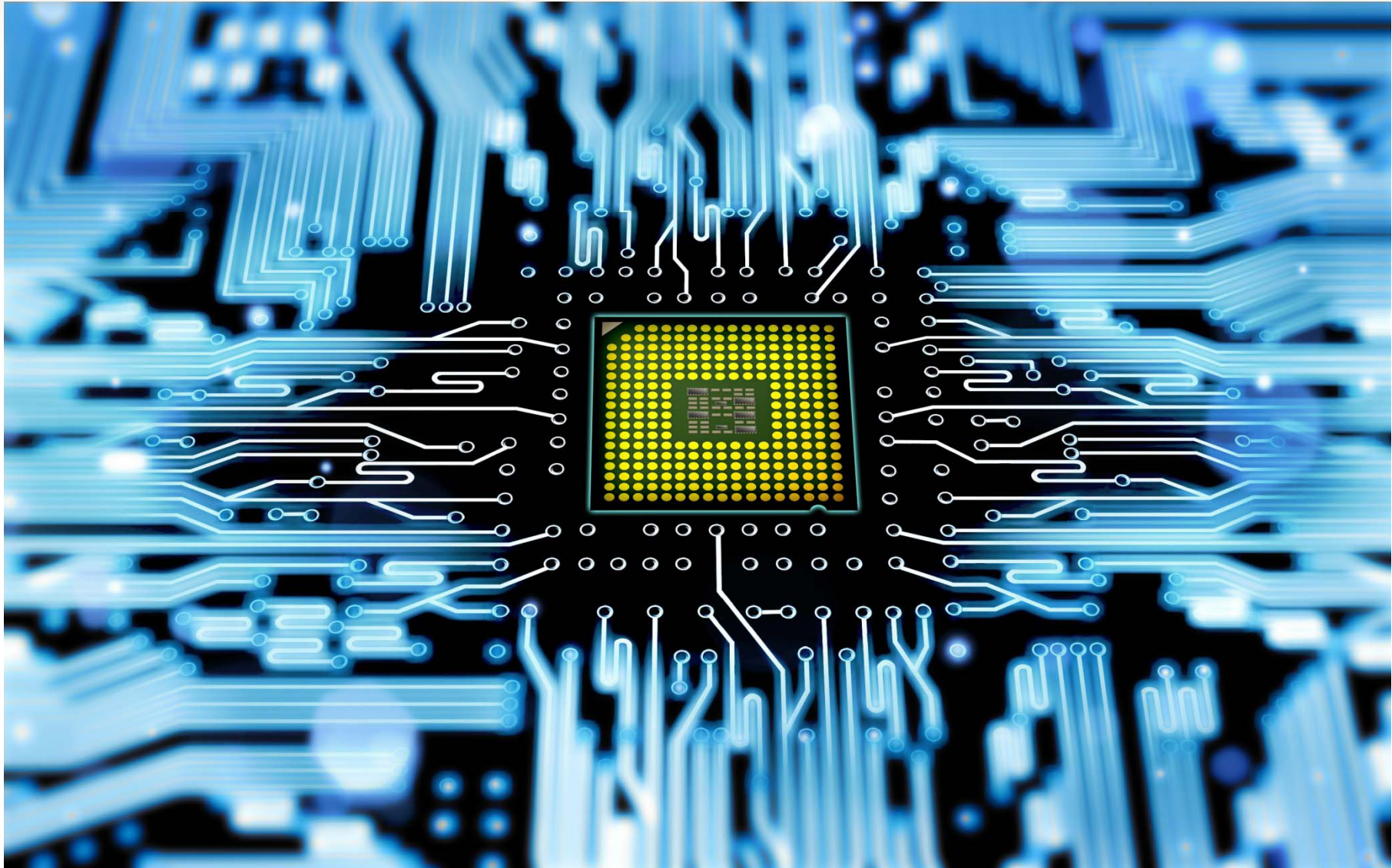


Maxwell-Boltzmann Verteilung  
 $F_{MB}(E) \sim \exp(-\beta E)$   
 klassisches Gas  
 Teilchen sind identisch aber unterscheidbar

## Diagnose

- bei hohen Temperaturen nähern sich Bose und Fermi Verteilung Maxwell an
- Maxwell-Boltzmann Statistik ist klassischer Limit (thermodynamisches Teilchengas)
- Maxwell wird verwendet, wenn deBroglie Wellenlänge deutlich geringer als Teilchenabstand

# Thema Festkörper Halbleiter



# Metall in Kontakt mit Metall

## Kontaktpotenzial

Fermienergie Bereich A

$$E_F^A = -2 \text{ eV}$$

Potenzielle Energie Bereich A

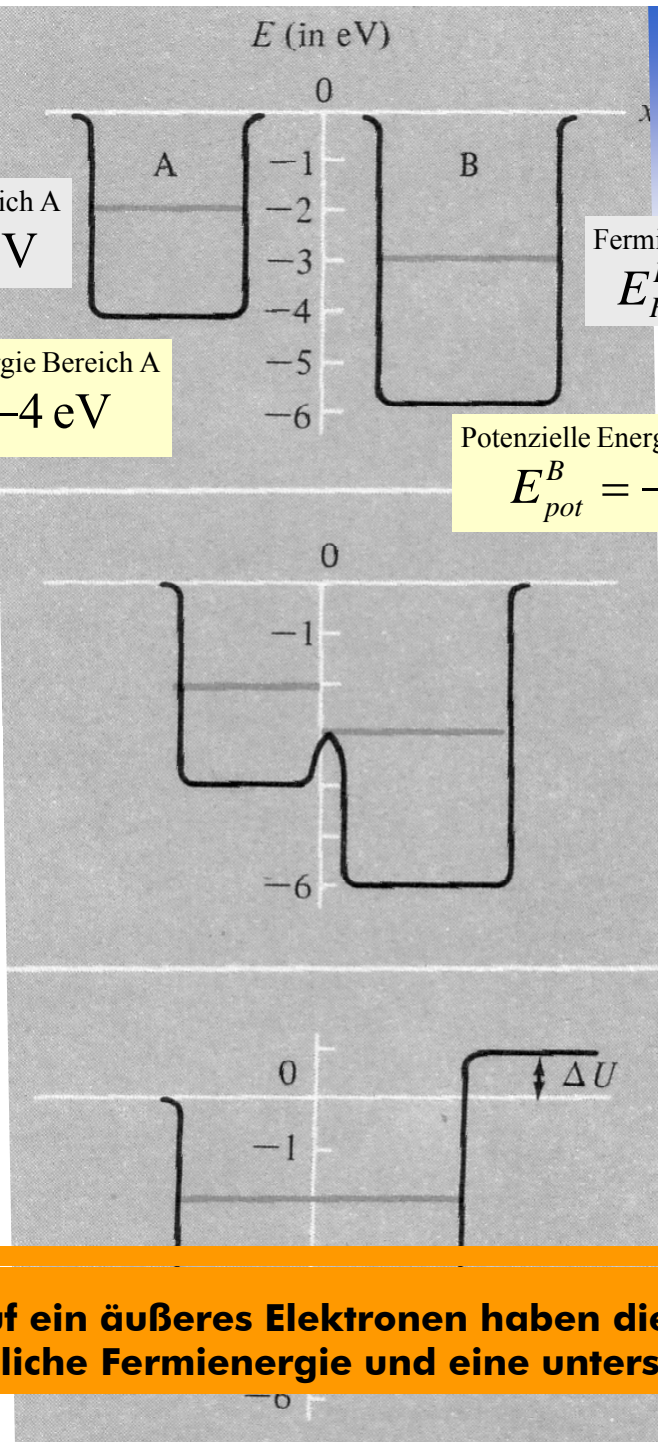
$$E_{pot}^A = -4 \text{ eV}$$

Fermienergie Bereich B

$$E_F^B = -3 \text{ eV}$$

Potenzielle Energie Bereich B

$$E_{pot}^B = -6 \text{ eV}$$

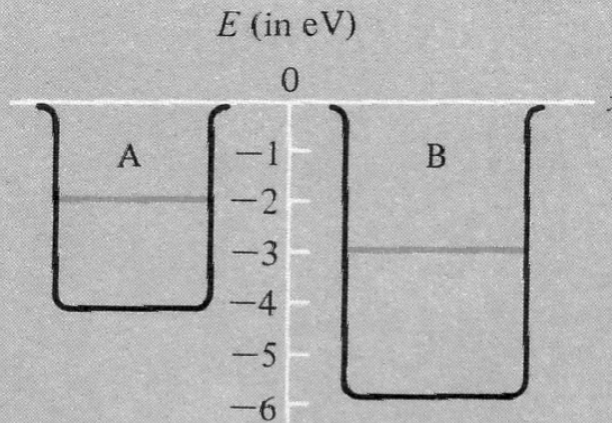


### Diagnose

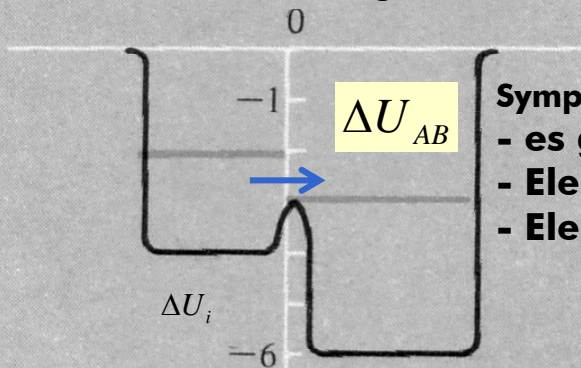
Bezogen auf ein äußeres Elektronen haben die beiden Metalle eine unterschiedliche Fermienergie und eine unterschiedliche Tiefe des Potenzialtopfes

# Metall in Kontakt mit Metall

## Kontaktpotenzial

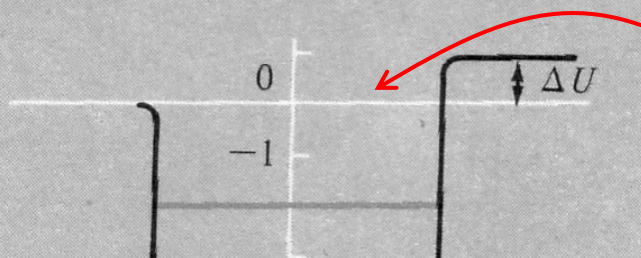


Metalle in Kontakt gebracht



Symptome

- es gibt Potenzialdifferenz bei Kontakt
- Elektronen aus dem Bereich (A) strömen in den Bereich (B)
- Elektronen besetzen bislang freie Zustände oberhalb der Fermienergie



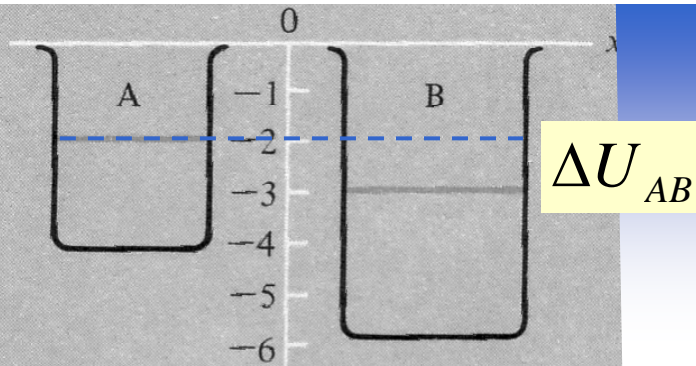
- um Elektron an Metall anzulagern, ist Arbeit erforderlich
- Energie ist notwendig, um die Potenzialbarriere zu überwinden

Diagnose

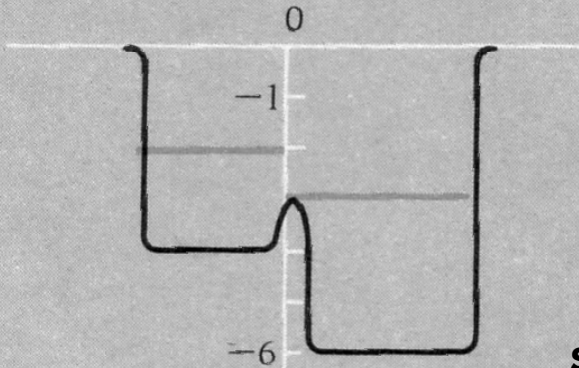
- Metall B lädt sich im Vergleich zu Metall A NEGATIV auf
- um Elektron von AUSSERHALB nach (B) zu verschieben, ist zusätzliche Arbeit nötig

# Metall in Kontakt mit Metall

## Kontaktpotenzial



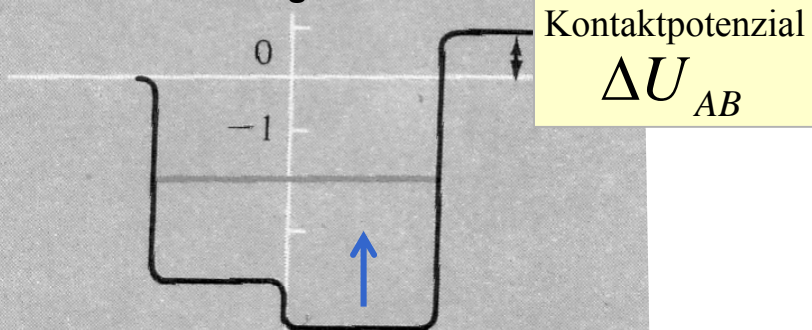
Metalle in Kontakt gebracht



Symptome

Potenzialtopf (B) wird im Vergleich zu (A) energetisch angehoben

Gleichgewicht



Kontaktpotenzial

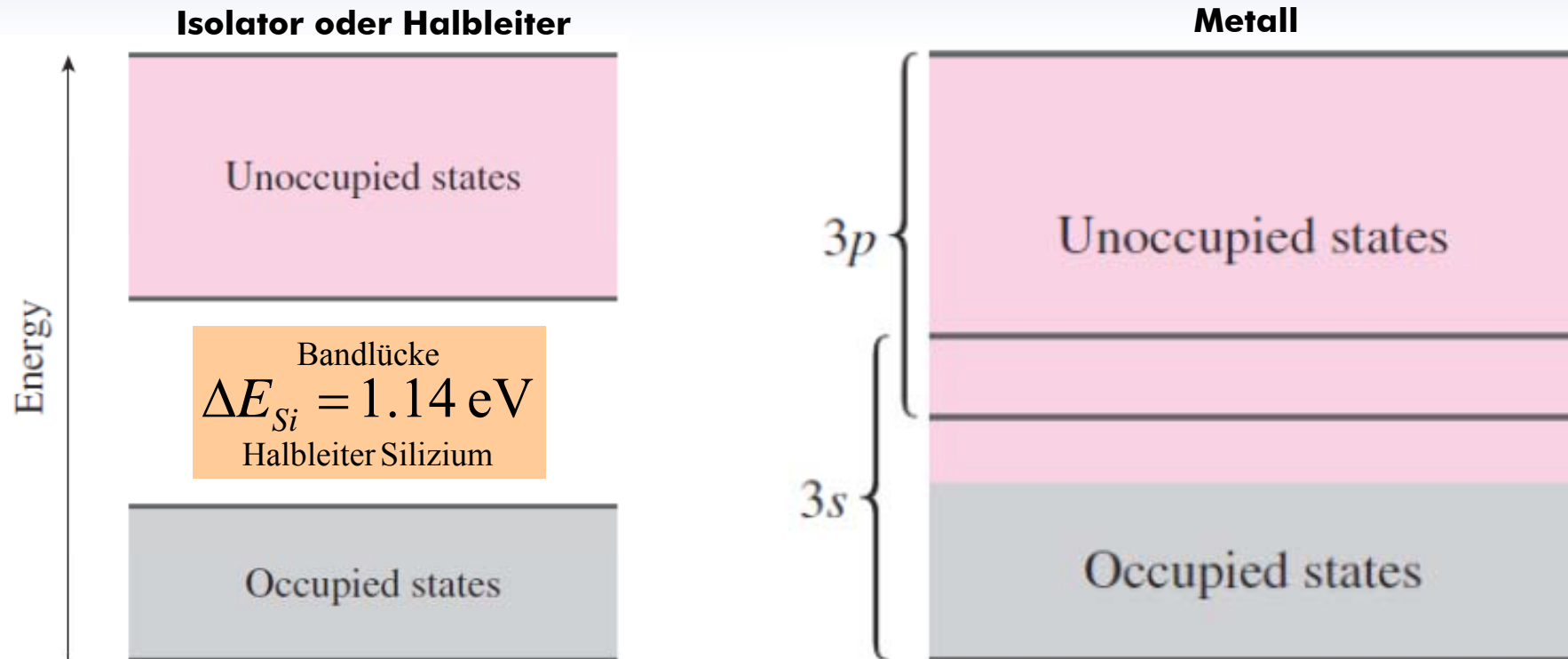
$$\Delta U_{AB}$$

Diagnose

- Vorgang stoppt, wenn Fermi-Energien sich angeglichen haben (Gleichgewicht)
- Kontaktpotenzial  $\Delta U$  entspricht ursprünglicher Potenzialdifferenz



# Bandstruktur Leiter vs Isolator

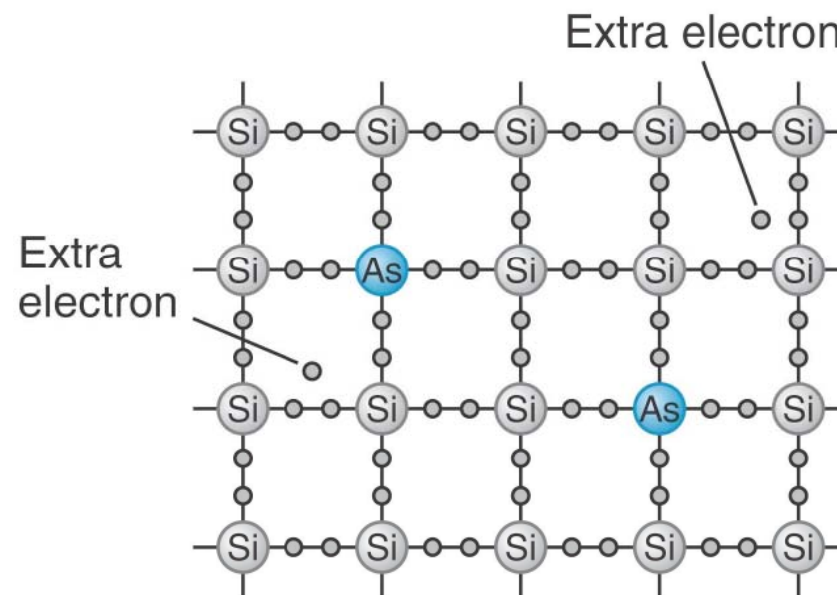
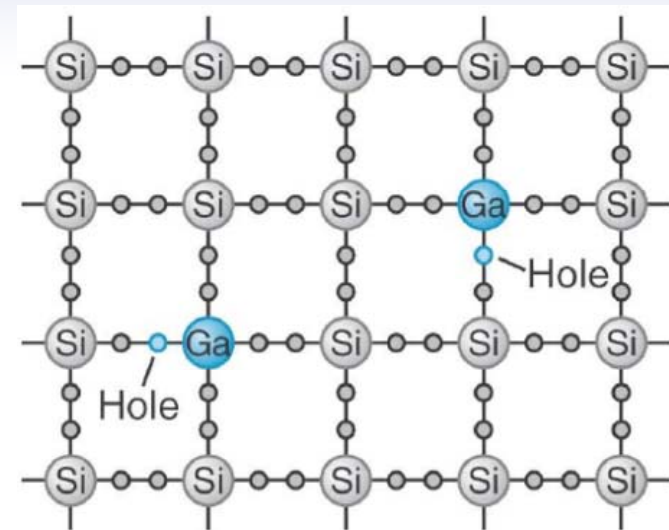


## Diagnose

- klassisch können sich Ladungen im Festkörper frei bewegen
- quantenmechanisch muss Elektron zunächst in unbesetztes Niveau gebracht werden
- in Leitern überlappen besetzte und unbesetzte Zustände der Bänder
- in Natrium ist Band aufgrund des einzelnen Valenzelektrons nur halb besetzt  
deshalb ist kaum Energie notwendig, um Elektronen frei beweglich zu machen
- in Isolator braucht Elektron hohe Überschussenergie, um unbesetzte Zustände zu erreichen

# physikalisch relevant Bandlücken

Semiconductor	Band-Gap Energy (eV)
Si	1.14
Ge	0.67
InAs	0.35
InP	1.35
GaP	2.26
GaAs	1.43
CdS	2.42
CdSe	1.74
ZnO	3.2
ZnS	3.6





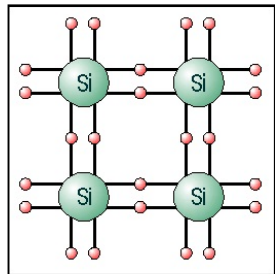
# Temperaturabhängigkeit ... Halbleiter,...

## Halbleiter (Silizium, Germanium)

Temperaturabhängigkeit des spezifischen Widerstandes  
 $\rho_{spez}(T) = \rho(T_i)(1 + \alpha_e(T - T_i))$   
nahezu linear für jeweils eng gewählten Temperaturbereich



Leitfähigkeit  
Metall vs Halbleiter

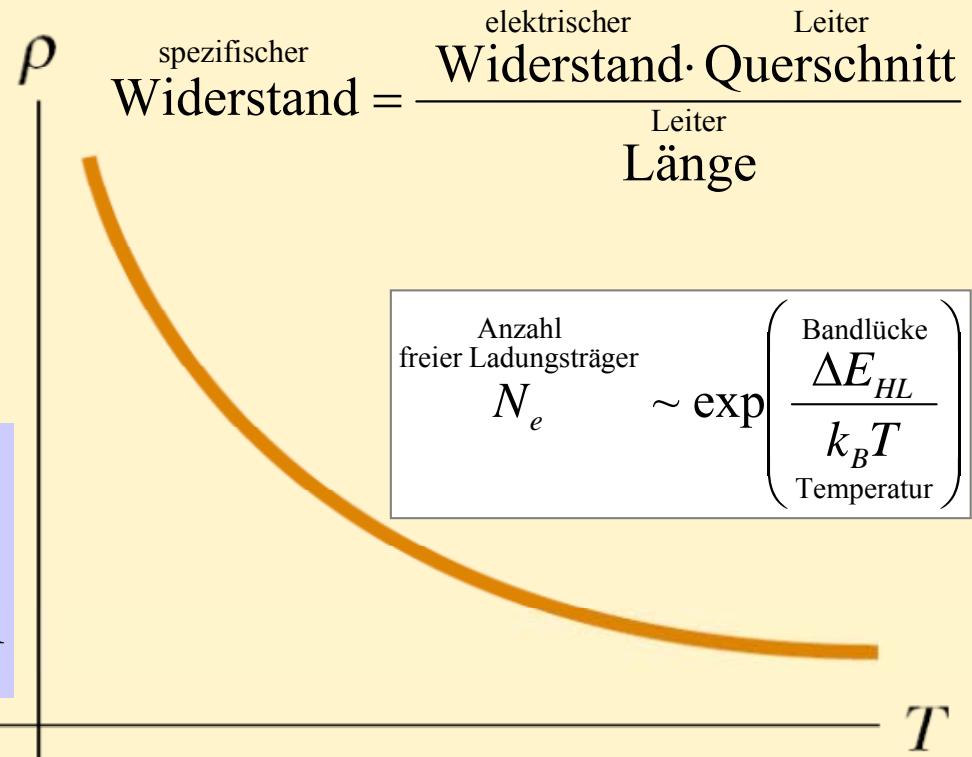


### Beispiel Silizium

$$\rho_{spez}^{Si} = 640.0 \Omega m$$

$$\alpha_e^{Si} = -75.0 \cdot 10^{-3} / K$$

Materialkonstante ist NEGATIV

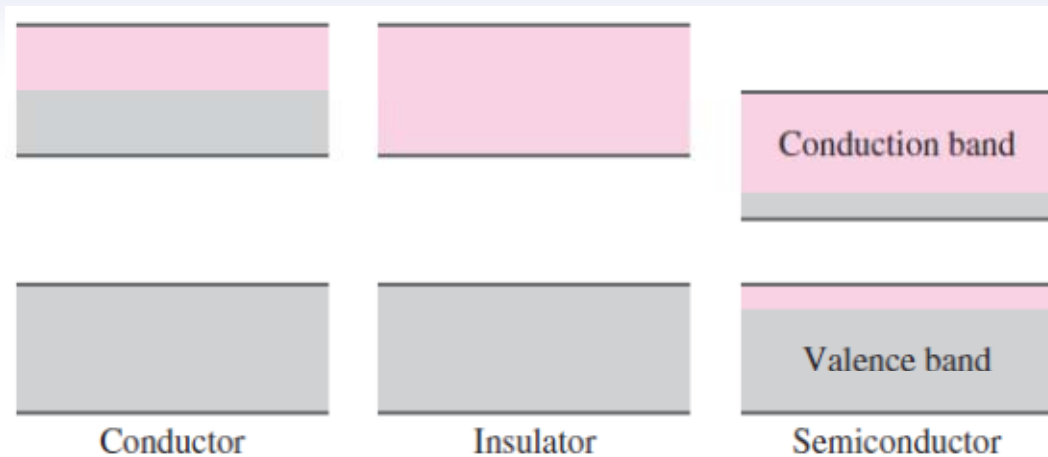


### Symptome

- im Gegensatz zu Metallen ist der Temperaturkoeffizient in Halbleitern NEGATIV
- für höhere Temperaturen sinkt deshalb spezifischer Widerstand in Halbleiter
- kinetische Energie der Elektronen reicht aus, um Bandlücke zu überwinden
- für niedrige Temperaturen nimmt Anzahl verfügbarer freier Ladungsträger exponentiell ab
- Exponentialterm vergleicht Energielücke mit der thermischen Energie im System

# Elemente der vierten Hauptgruppe

## Halbleiter



		Hauptgruppen				
		II	III	IV	V	VI
Periode	2	9,0 Be 4	10,8 B 5	12,0 C 6	14,0 N 7	16,0 O 8
	3	24,3 Mg 12	27,0 Al 13	28,1 Si 14	31,0 P 15	32,1 S 16
	4	40,1 Ca 20	69,7 Ga 31	72,6 Ge 32	74,9 As 33	79,0 Se 34
	5	87,6 Sr 38	114,8 In 49	118,7 Sn 50	121,8 Sb 51	127,6 Te 52
	6	137,3 Ba 56	204,4 Tl 81	207,2 Pb 82	209,0 Bi 83	209 Po 84

### Diagnose

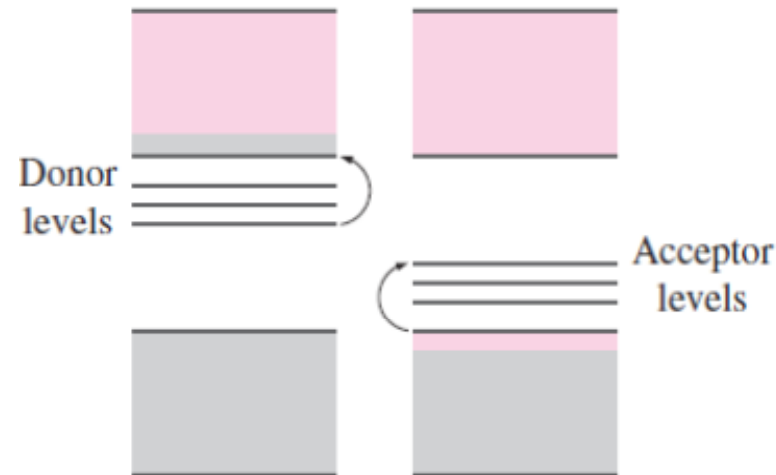
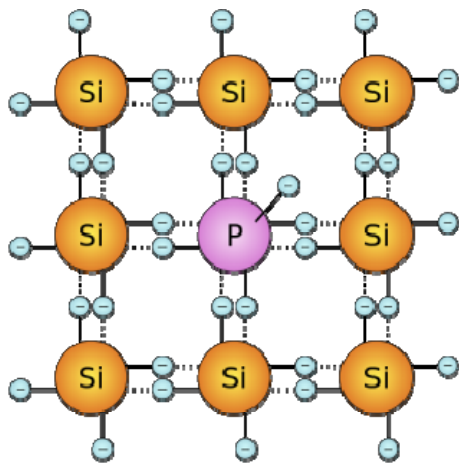
- durch thermische Aktivierung gelangen Elektronen in Halbleitern in das Leitungsband
- Absenkung der Bandlücke erhöht Leitfähigkeit
- durch Dotierung kann Energiedifferenz der Bandlücke beeinflusst werden
- kombiniere dazu Halbleitermaterialien mit Elementen der III oder V Hauptgruppe

# Halbleiter Dotierung



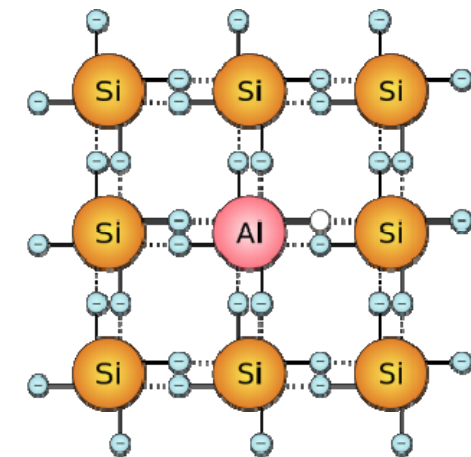
zusätzliche Elektronen  
n – Typ

Halbleiter



zusätzliche Löcher  
p – Typ

Halbleiter



## Diagnose

- **Dotierung von Halbleitern mit Elemente III, IV Hauptgruppe erzeugt Zustände in Bandlücke**
- **n-Dotierung durch Elemente wie Phosphor (5 Valenzelektronen)**  
sogenannte **Donor-Zustände unterhalb Leitungsband**  
**Ladungsträger sind in diesem Fall die Elektronen**
- **p-Dotierung durch Elemente wie Bor (3 Valenzelektronen)**  
sogenannte **Akzeptor-Zustände oberhalb Valenzband**  
**Löcher sind in diesem Fall positive Ladungsträger**

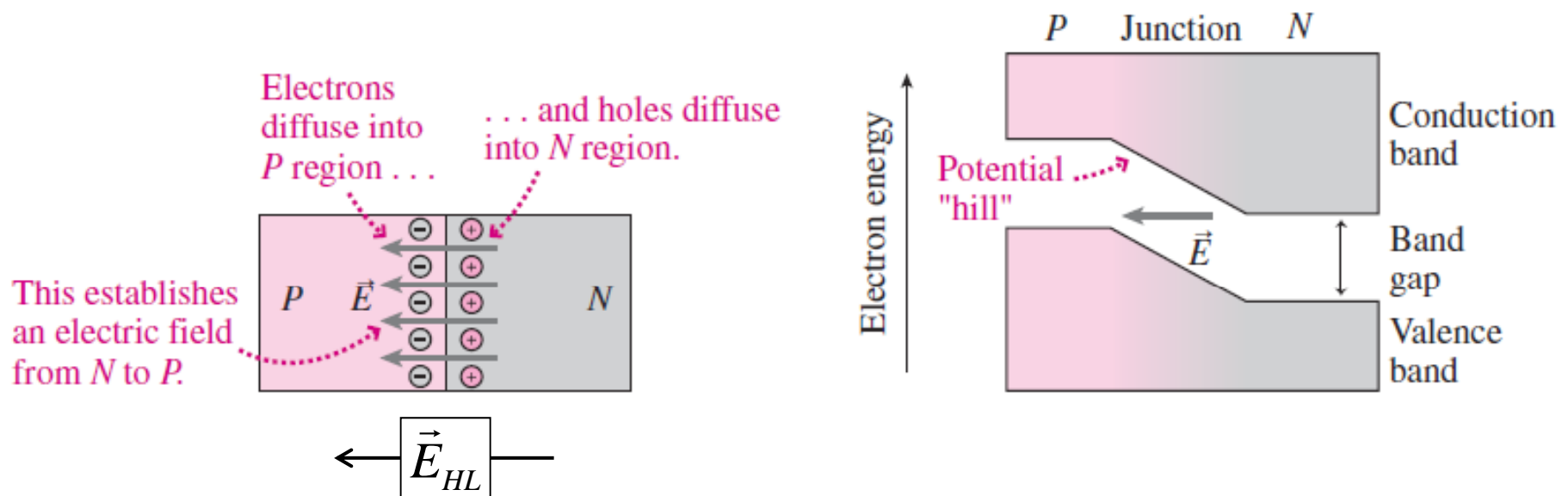
# Halbleiter Eigenschaften

	Ge	Si	GaAs
Kristallstruktur	Diamant	Diamant	Zinkblende
Gitterkonstante $a$ in $10^{-10}$ m	5,65771	5,43043	5,65325
linearer Ausdehnungskoeffizient $\alpha$ in $10^{-6}$ K $^{-1}$	5,90	2,56	6,86
spezifische Wärmekapazität $c$ in kJ/(kg K)	0,31	0,70	0,35
Wärmeleitfähigkeit $\lambda$ in W/(m K)	64	145	46
Schmelzpunkt $\vartheta_s$ in °C	937	1 415	1 238
Atomdichte $N/V$ in $10^{22}$ cm $^{-3}$	4,42	5,0	4,42
Dichte $\rho$ in kg/m $^3$	5 326,7	2 328	5 320
Molmasse $M$ in g/mol	72,60	28,09	144,63
Bandgap $E_g$ in eV	0,660	1,11	1,43
intrinsische Trägerdichte $n_i$ in cm $^{-3}$	$2,33 \cdot 10^{13}$	$1,02 \cdot 10^{10}$	$2,00 \cdot 10^6$
Effektive Zustandsdichte im Leitungsband $N_L$ in cm $^{-3}$	$1,24 \cdot 10^{19}$	$2,85 \cdot 10^{19}$	$4,55 \cdot 10^{17}$
im Valenzband $N_V$ in cm $^{-3}$	$5,35 \cdot 10^{18}$	$1,62 \cdot 10^{19}$	$9,32 \cdot 10^{18}$
relative Dielektrizitätszahl	16	11,8	12,9
Beweglichkeit $\mu_n$ in cm $^2$ /(V s)	3 900	1 350	8 500
$\mu_p$ in cm $^2$ /(V s)	1 900	480	435

# Halbleiter in Kontakt pn-Übergang

## Symptome

- Diffusion von negativer Ladungsträger (Elektronen) in p-Gebiet lädt p-Bereich negativ auf
- Diffusion von positiver Ladungsträger (Löcher) in n-Gebiet lädt Bereich positiv auf
- Übergangsbereich wird von Ladungsträgern entvölkert und reduziert Leitfähigkeit
- Ladungstrennung erzeugt elektrisches Feld in n-p Richtung (Diffusionsspannung)
- weitere Ladungsdiffusion wird dadurch unterbunden und Gleichgewicht stellt sich ein



## Diagnose

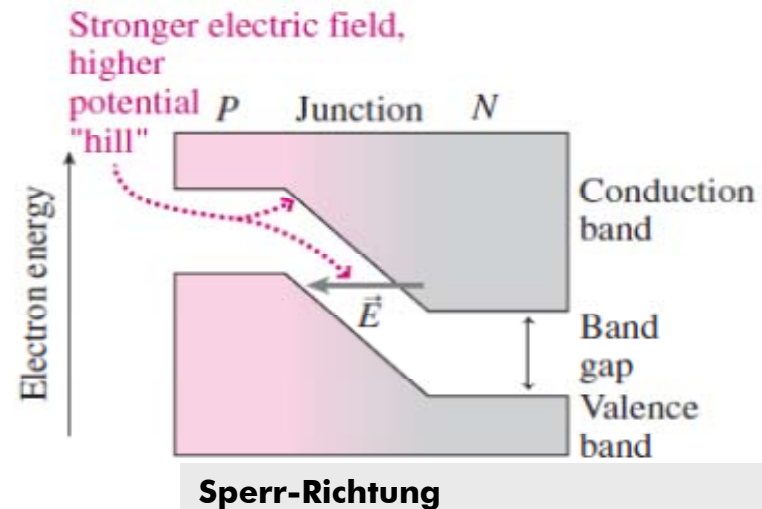
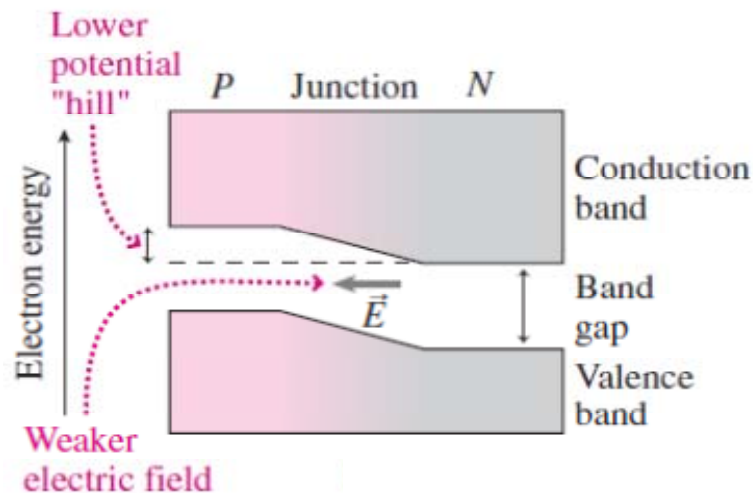
- Elektronen in p-Bereich haben höhere potenzielle Energie
- Bandstruktur wird im Bereich des Übergangs modifiziert

# PN-Übergang Halbleiterdiode

## Symptome

- durch eine angelegte Spannung kann elektrisches Feld reduziert werden
- Barriere reduziert sich, da p-Bereich wird weniger positiv und n-Bereich weniger negativ
- Leitfähigkeit wird herabgesetzt (guter Leiter in sogenannter Durchlass-Richtung)

## Durchlass-Richtung



- durch umgekehrt gepolte Spannung kann elektrisches Feld erhöht werden
- Barriere erhöht sich, da p-Bereich wird stärker positiv und n-Bereich stärker negativ
- Leitfähigkeit wird erniedrigt (schlechter Leiter in sogenannter Sperrrichtung)

## Diagnose

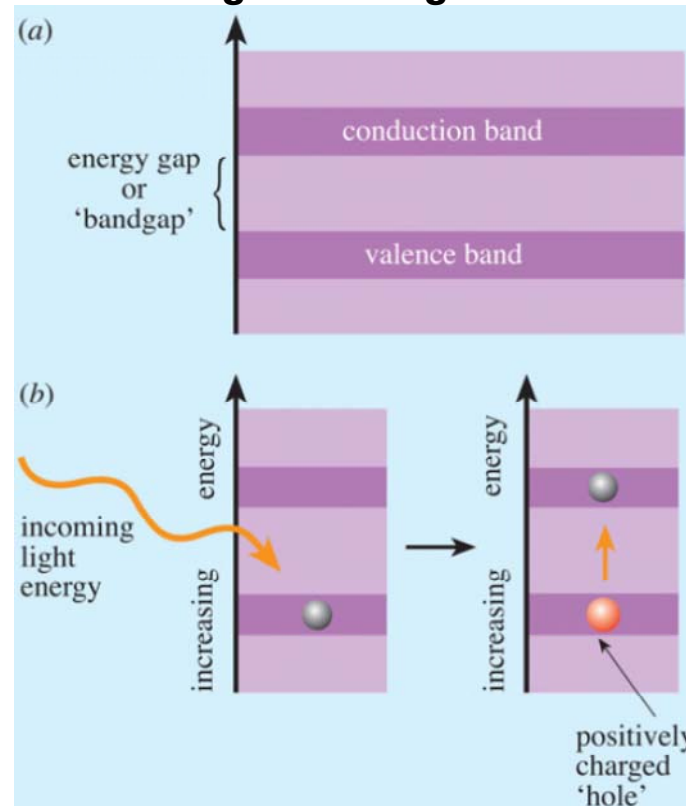
- Elektronen und Löcher, die pn-Grenzbereich überqueren, können rekombinieren
- Energiefreisetzung bei Rekombination zum Beispiel in Form von Licht (LED)
- Energieabsorption aus Licht kann Elektron-Loch Paare erzeugen (Solarzelle)
- Bandlücke bestimmt Wellenlänge des ausgestrahlten Lichts (Planck)

# Halbleiter

## Lichtabsorption und -Emission

### Symptome

- Elektronen und Löcher, die pn-Grenzbereich überqueren, können rekombinieren
- Energiefreisetzung bei Rekombination zum Beispiel in Form von Licht (LED)
- Energieabsorption aus Licht kann Elektron-Loch Paare erzeugen (Solarzelle)
- Bandlücke bestimmt die Wellenlänge des ausgestrahlten Lichts (Planck)



band gap gefordert 1.0 bis 1.5 eV

$$\Delta E_{HL} \approx h \nu_{VIS}$$

sichtbares Licht



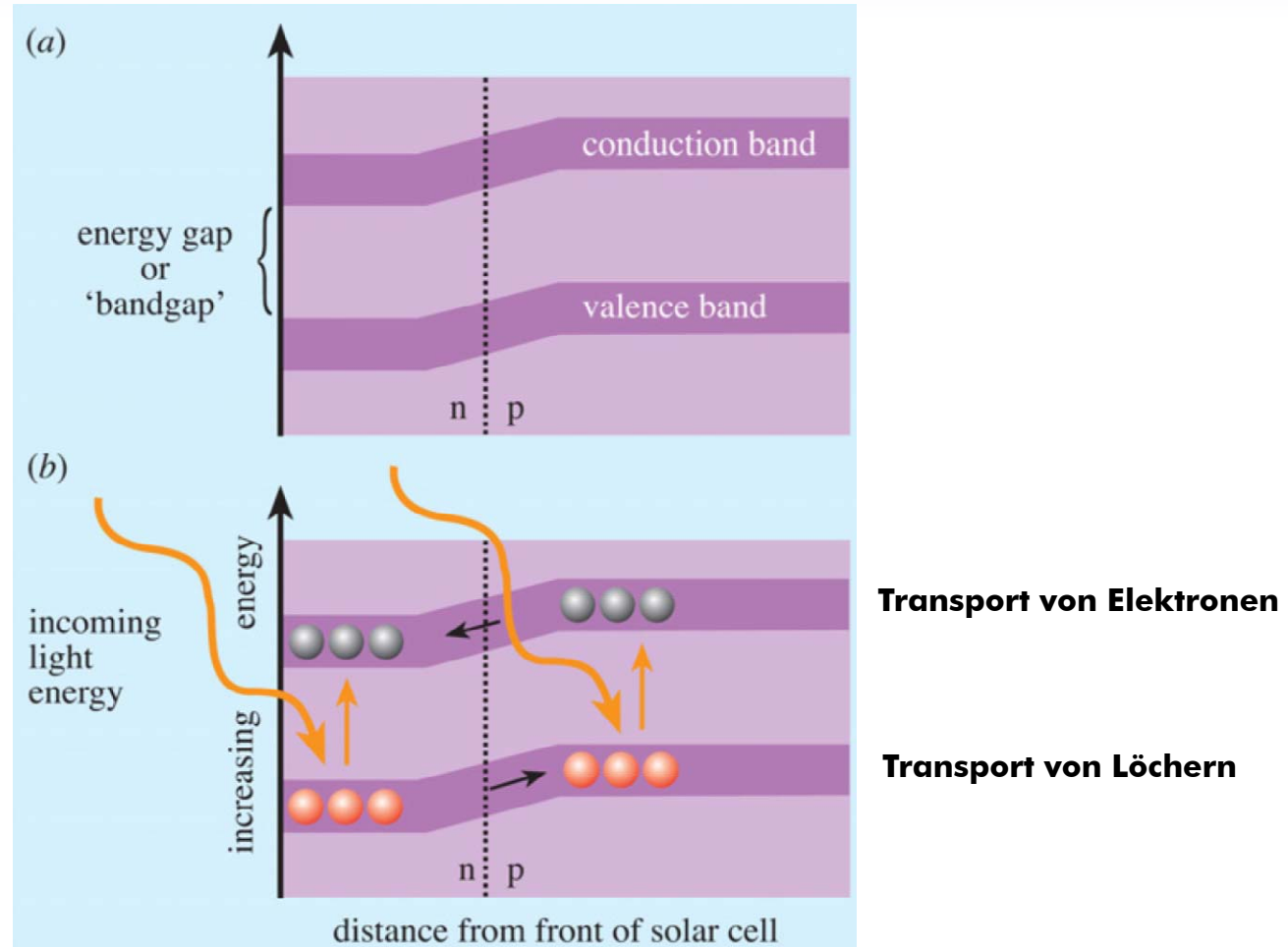
### Diagnose

- Elektronen können durch Photon ausreichender Energie in Leitungsband angehoben werden
- für Einsatz regenerative Energien sollte Sonnenlicht diesen Absorptionsübergang auslösen

# Halbleiter Lichtabsorption

Symptome

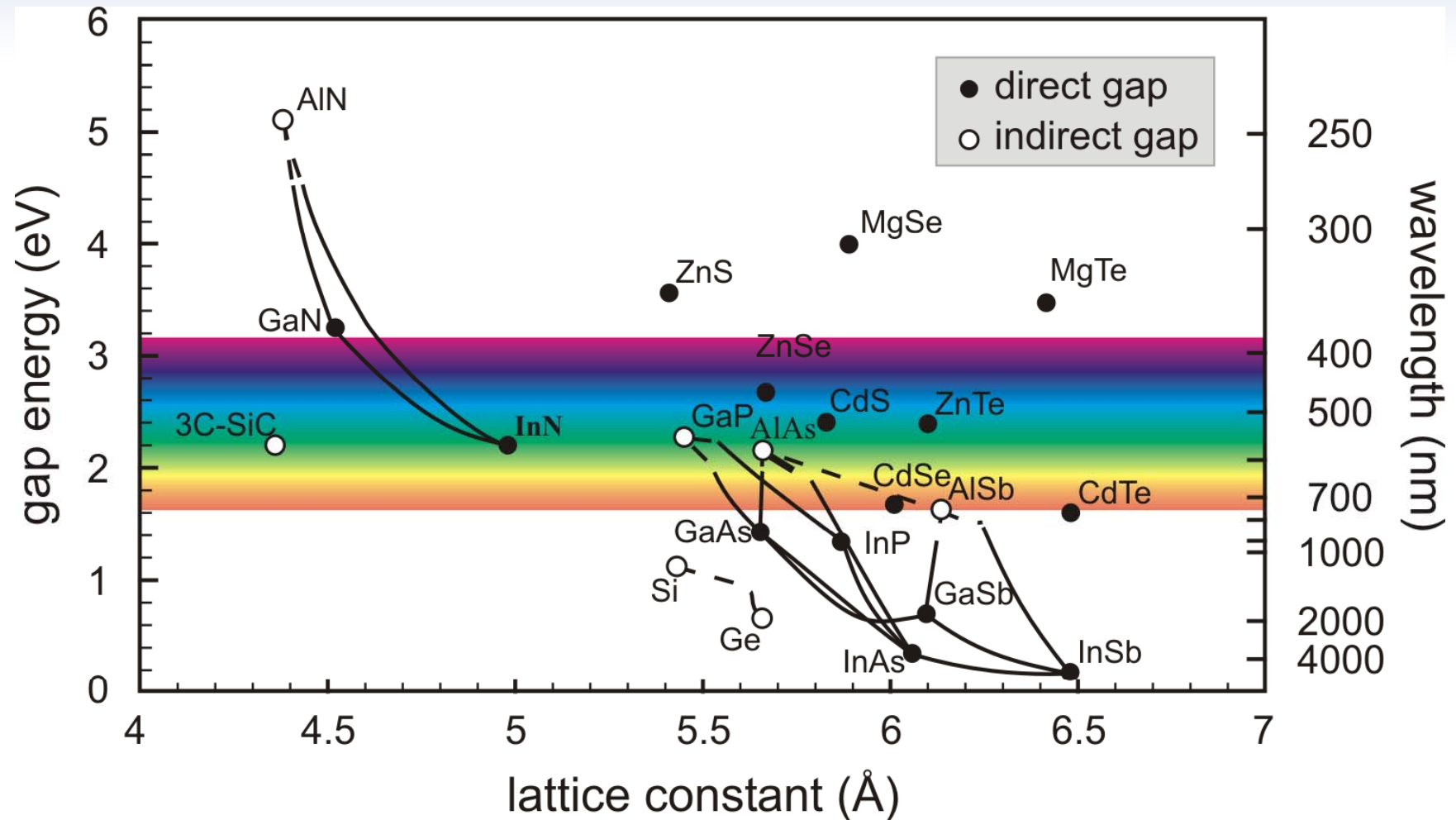
Durch Lichtabsorption werden Ladungsträger getrennt



Diagnose

Elektrisches Feld an p-n Grenzfläche führt zu Ladungstransport von Elektronen und Löchern

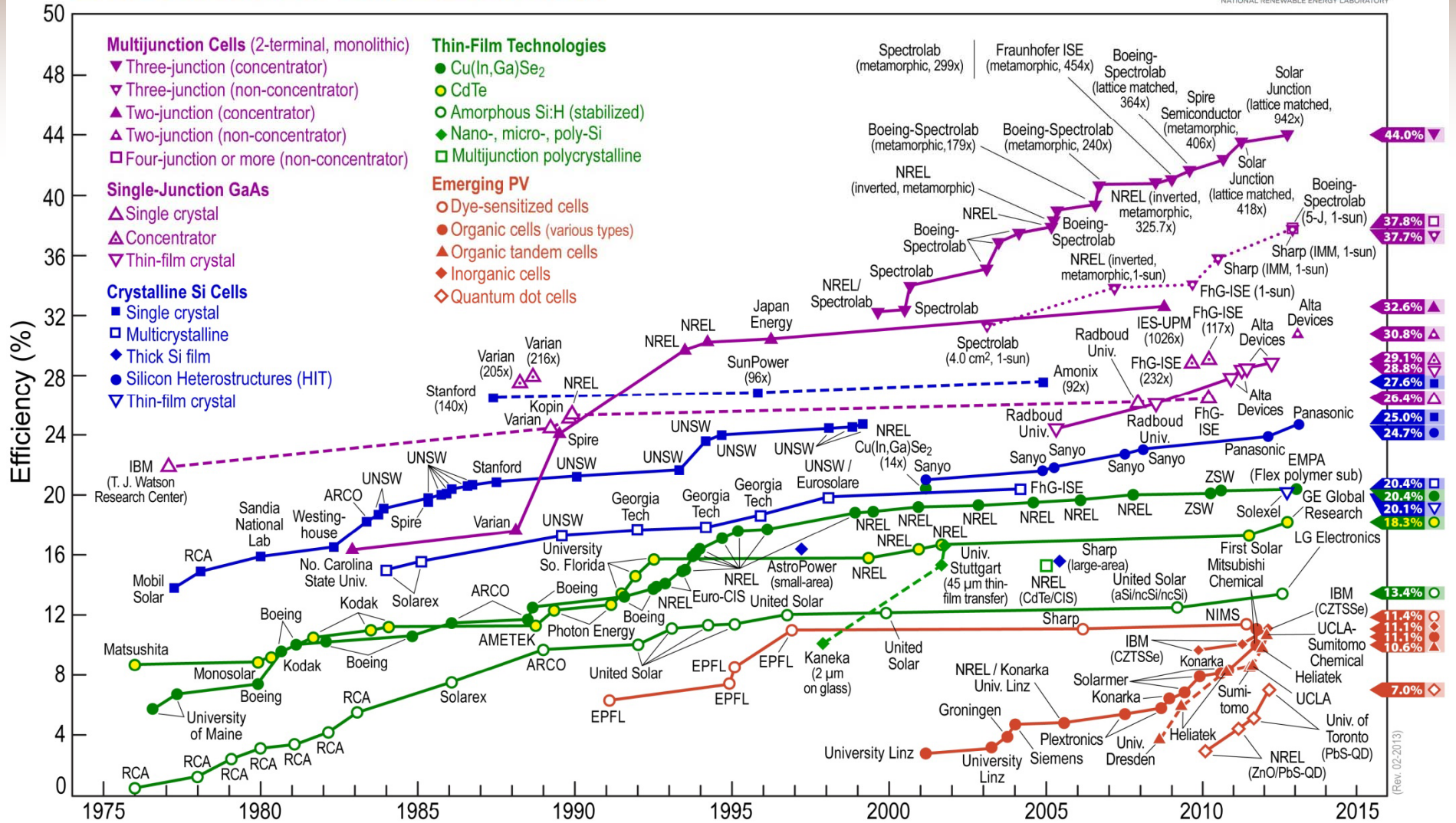
# Energie aus Sonnenlicht Solarzellen



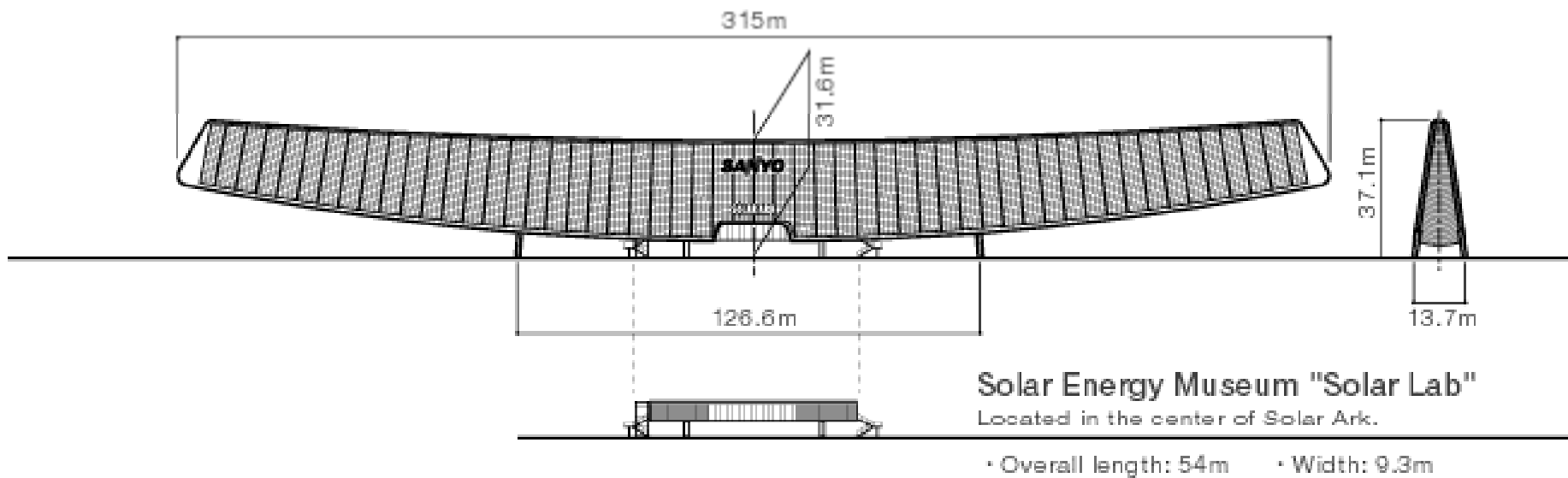
## Diagnose

- geringere Bandlücke erlaubt Absorption niederenergetischerer Strahlung aus Sonnenlicht
- Effizienz Solarzelle wird erhöht, da Strahlung aus größerem Wellenlängenbereich genutzt wird

# Best Research-Cell Efficiencies



# Sanyo Solar Ark



## Diagnose

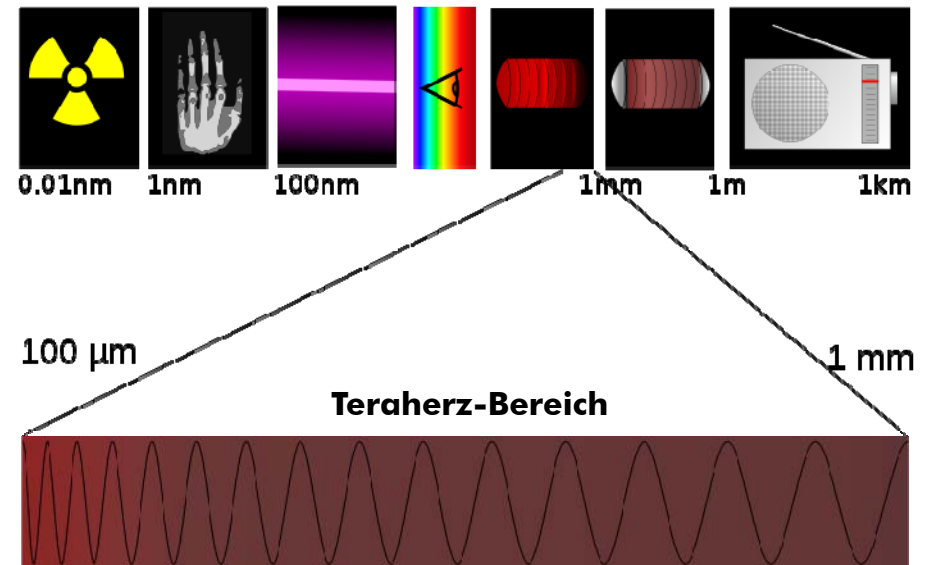
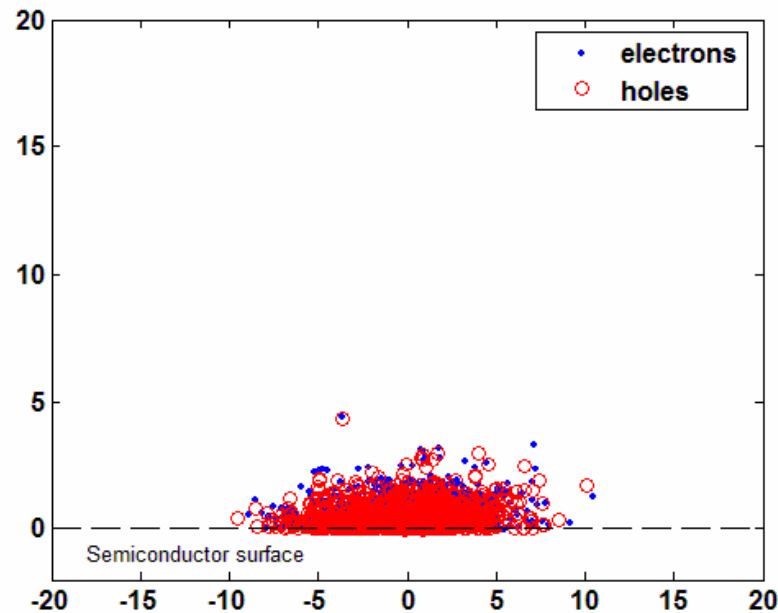
**5000 Solarzellenpanels erzeugen Spitzenleistung von 630 kW**

# Diffusion von Ladungsträgern im Halbleiter

## Dember-Effekt

### Symptome

- innerer Photoeffekt hebt Elektronen vom Valenzband über Bandlücke
- es entstehen sogenannte Elektron-Loch-Paare
- Dichte der Elektron-Loch-Paare an der Oberfläche am höchsten
- räumliche Abnahme der Elektron-Loch-Paare nach innen folgt Lambert-Beersches Gesetz



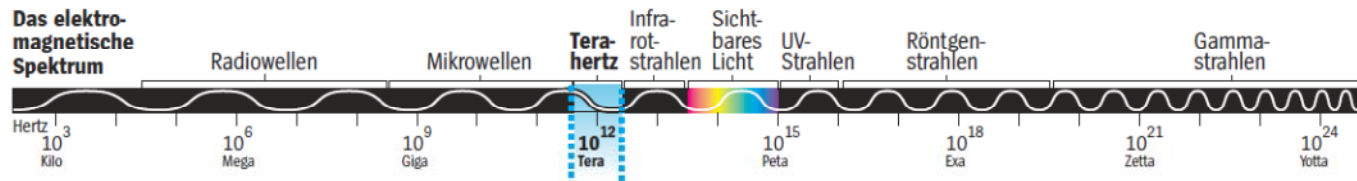
### Diagnose

- Gradient der Elektron-Loch-Paare führt zu einem Diffusionsstrom
- Elektronen und Löcher verschieden haben unterschiedliche effektive Massen
- effektiven Masse der Elektronen in der Regel geringer als die der Löcher
- Elektronen diffundieren daher schneller in den Halbleiter
- räumliche Trennung von Elektronen und Löchern erzeugt eine elektrische Spannung
- Dember-Effekt wird genutzt zur Erzeugung von Terahertz-Strahlung (z.B. Körperscanner)

Extrablatt

# Splitternackt auf dem Monitor

Eine geheimnisvolle Strahlung hält die Physiker in Bann: Allgegenwärtig und doch kaum nachweisbar strahlen die Terahertz-Wellen im Frequenzbereich zwischen Infrarotlicht und Mikrowellen. Nun sollen sie die Krebsvorsorge verbessern und die Flughäfen sicherer machen.

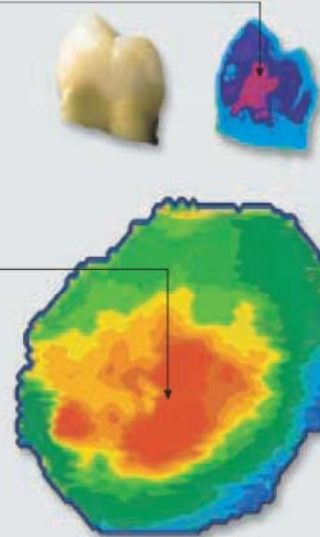


## Durchblick mit Terahertz-Strahlen

Hilft bei der Diagnose von äußerlich nicht sichtbarer Karies (pink).

Macht Hautkrebs sichtbar (rot), ohne dass eine Gewebeprobe entnommen werden müsste.

Dringt durch Kleidung und Papier.

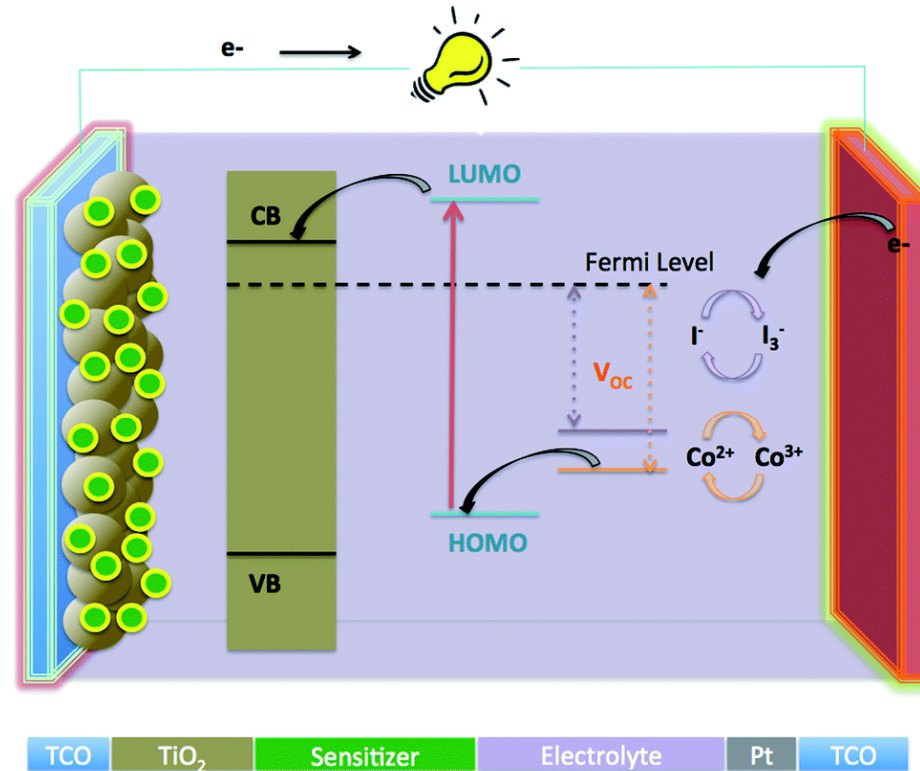


# Photosynthese technisch realisiert

## Grätzelzelle

### Symptome

- trifft Licht auf Farbstoffmolekül, werden Photonen absorbiert
- Energie der Photonen löst Elektronen von Farbstoffmolekülen
- Elektronen bewegen sich durch Titandioxidschicht zur TCO-Schicht der Photoelektrode
- an Verbraucher wird beispielsweise Licht erzeugt
- Rücktransport Elektronen zur Gegenelektrode, über Katalysator und durch Elektrolyten



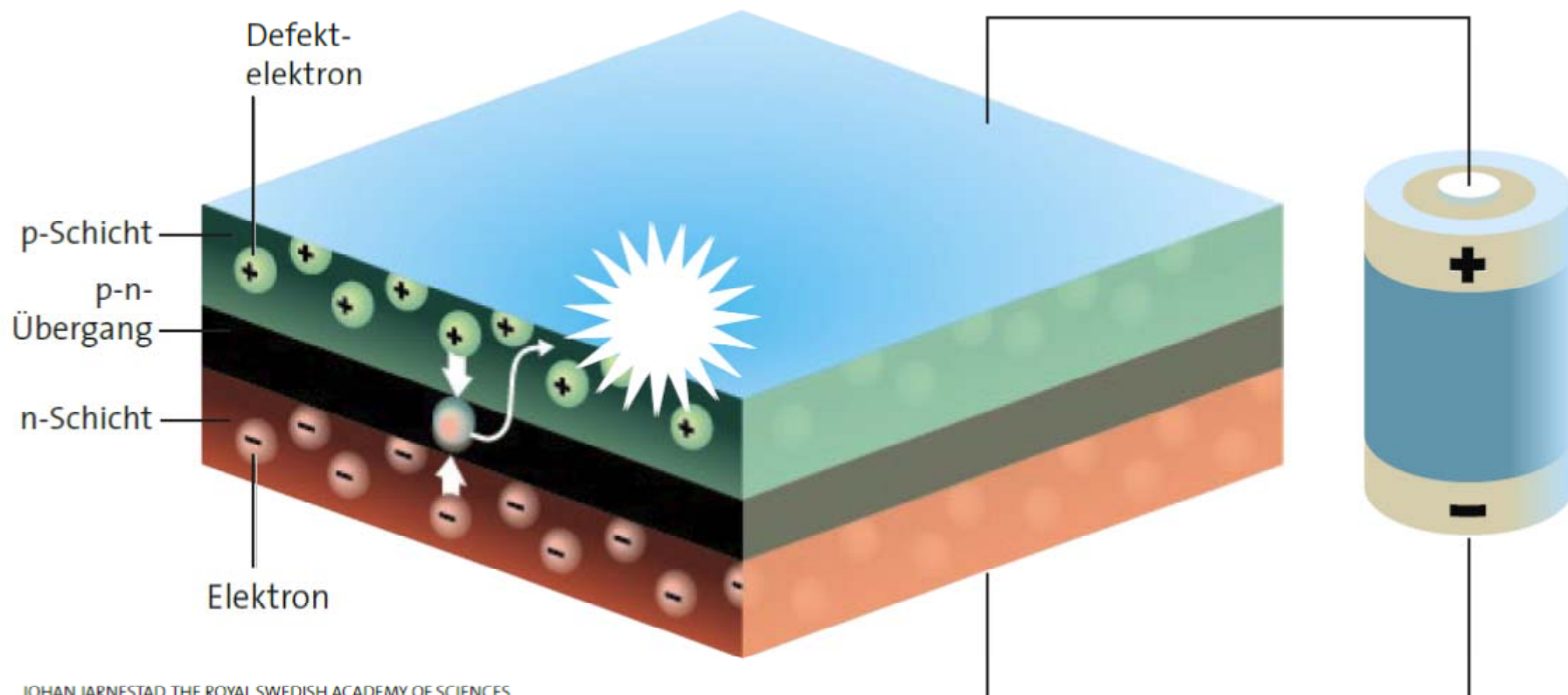
### Diagnose

**Kostengünstige Herstellung, aber zu geringer Wirkungsgrad im Vergleich zu Silizium**

# Leuchtdioden (LED)

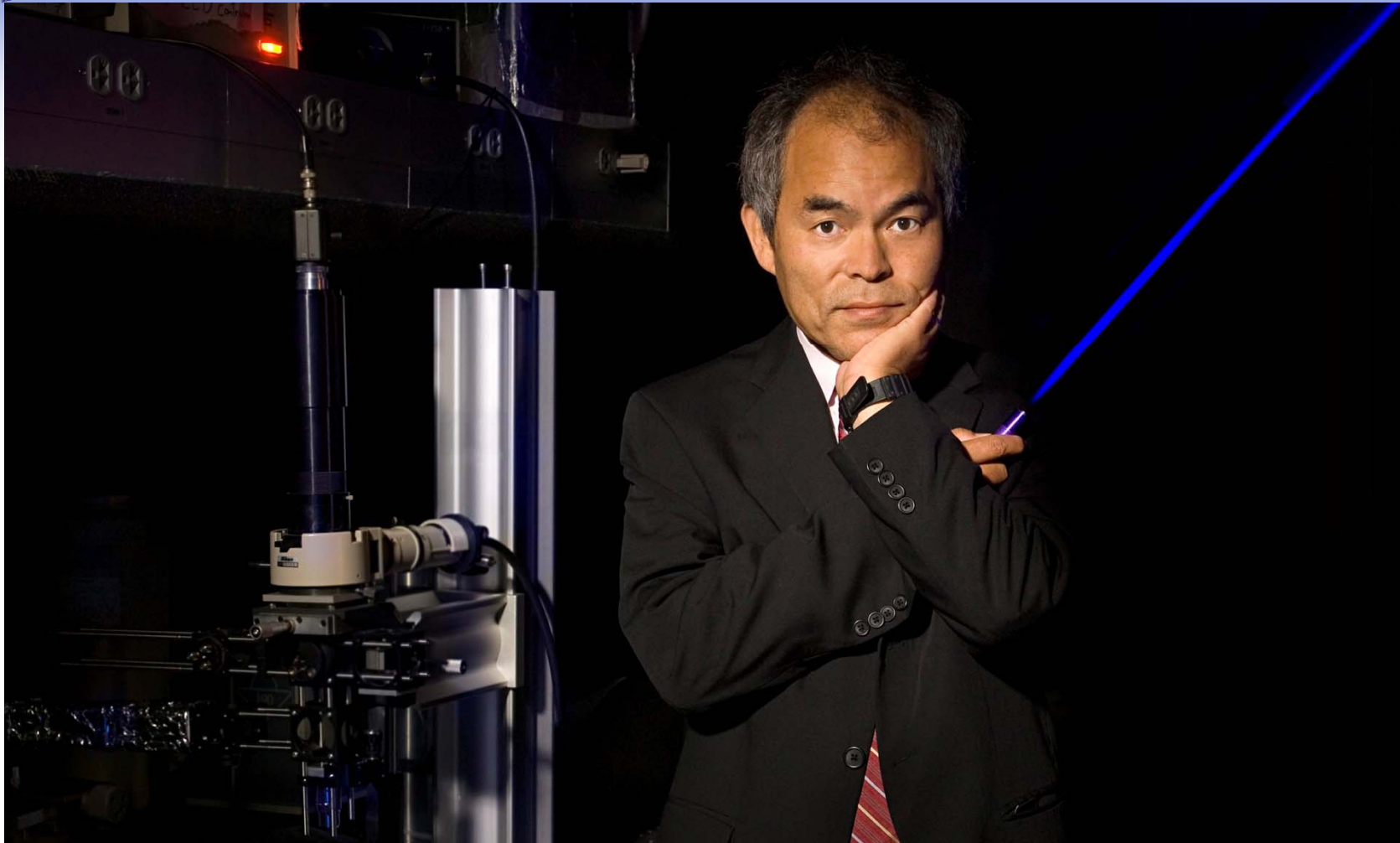
## Symptome

Zwischen elektronenarmer p- und elektronenreicher n-Schicht bildet sich eine *aktive Zone*



## Diagnose

- angelegte Spannung zwingt Ladungsträger in ladungsneutralen Übergangsbereich
- Energiebetrag hängt vom Halbleitermaterial ab
- Bei Leuchtdioden wird Energie in Form von Licht abgegeben

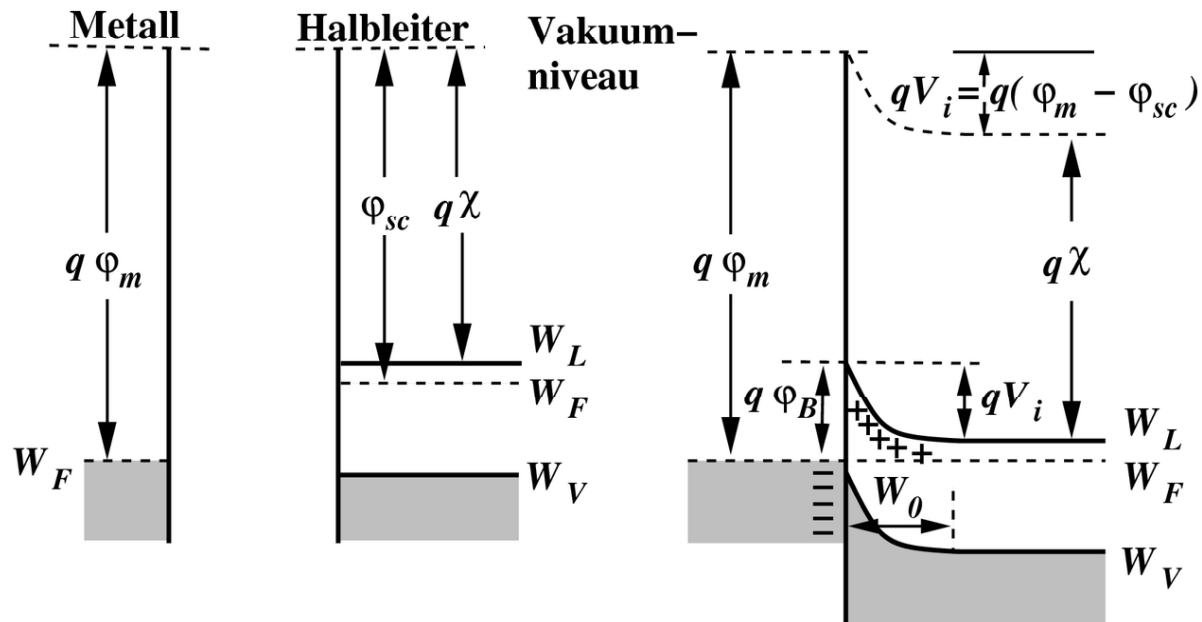


**The Nobel Prize in Physics 2014 was awarded jointly to Isamu Akasaki, Hiroshi Amano and Shuji Nakamura for the invention of efficient blue light-emitting diodes which has enabled bright and energy-saving white light sources**

# Metall in Kontakt mit Halbleiter Schottky-Kontakt

## Symptome

- Austrittsarbeit Elektronen beim Metall größer als beim Halbleiter
- Elektronen strömen aus Halbleiter in Metall über, bis Fermi-Niveaus angeglichen
- auf der Seite des Halbleiterseite bildet sich Elektronen-Verarmungszone
- auf der Seite des Metalls bildet Anreicherungszone aus
- elektrisches Feld in dieser Raumladungszone verhindert weitere Elektronenabgabe

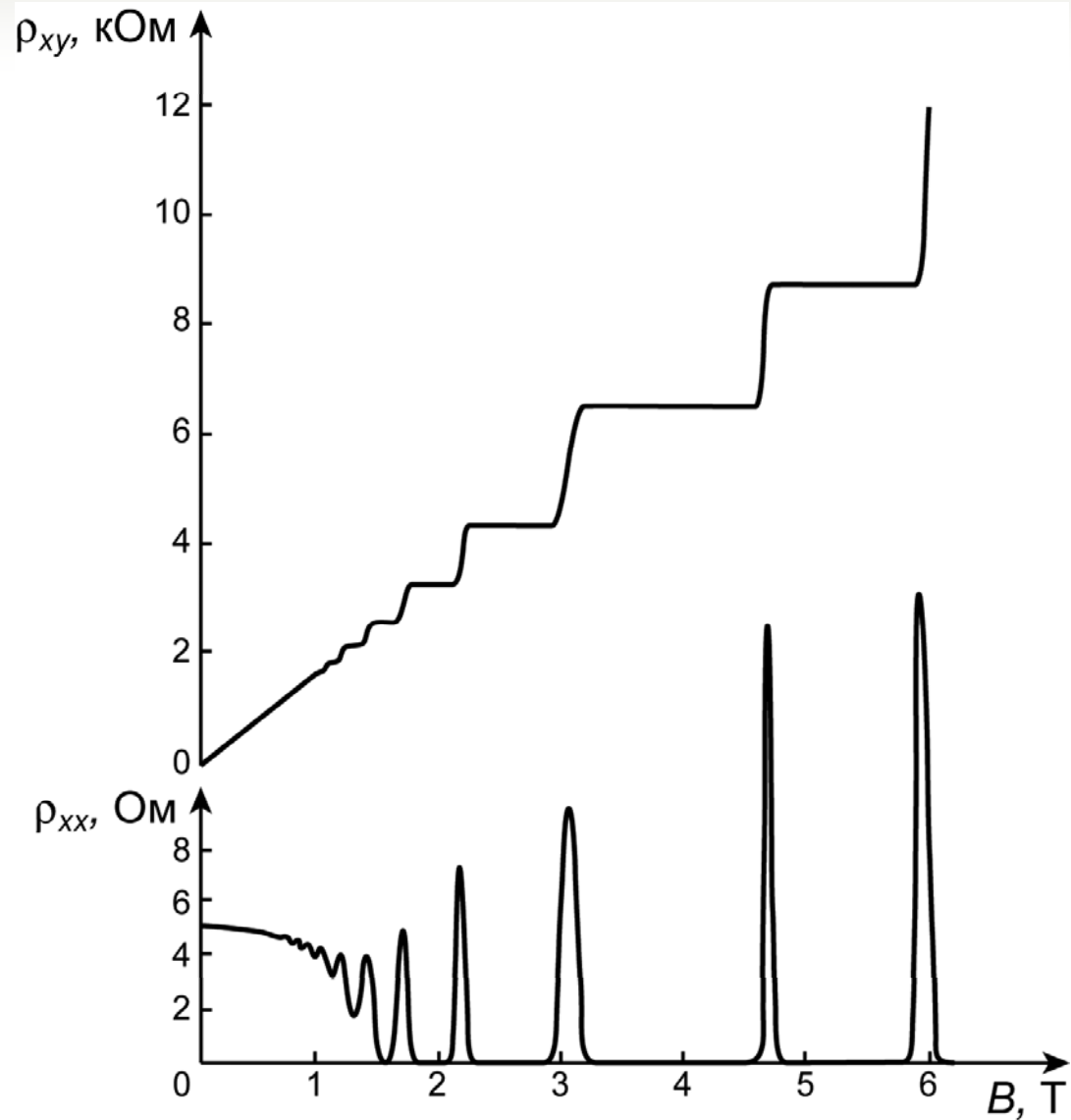


## Diagnose

- bei Anlegen Spannung treten Elektronen vom Halbleiter in Metall über (Vorwärtsstrom)
- bei umgekehrter Polung (Sperrrichtung) wird Raumladungszone vergrößert
- bis auf einen geringen Sperrstrom fließt kein Strom
- Schottky-Kontakt hat damit Charakteristik Gleichrichter wie pn-Übergang
- Schottky-Dioden können bis zu extrem hohen Frequenzen eingesetzt werden

# Thema Festkörper

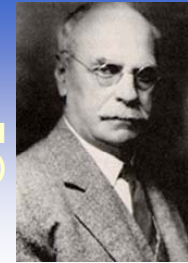
## Quanten-Halleffekt





# Nachweis schwacher Magnetfelder Hall-Effekt

Edwin Herbert Hall  
(1855-1938)

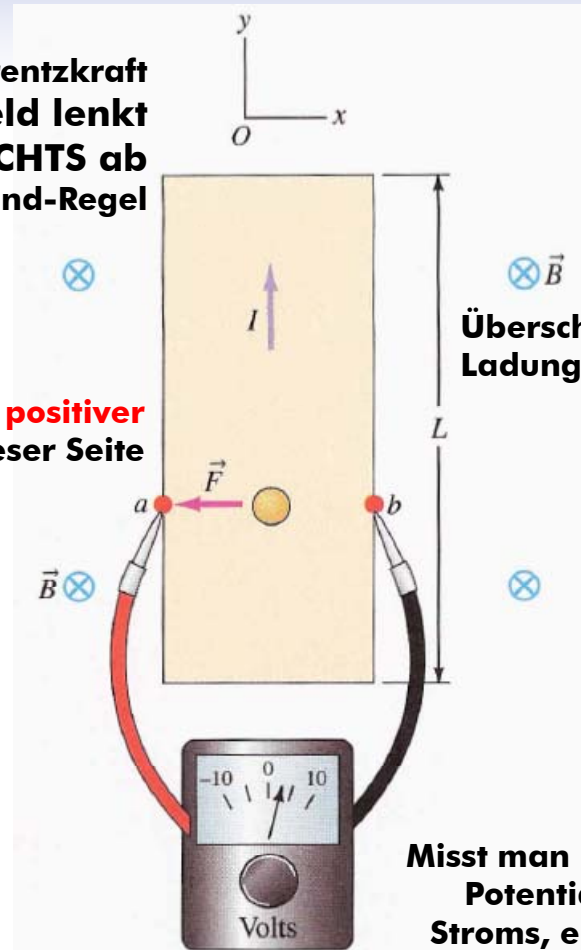
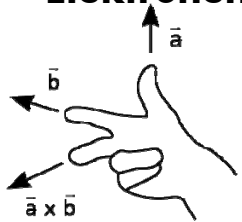


Entdeckung 1879

Elektron und Elementarladung noch nicht bekannt  
 $I_e B_M / U_H$  ist NUR eine Konstante

**Lorentzkraft**  
**Magnetisches Feld lenkt**  
**Elektronen nach RECHTS ab**  
**Linke-Hand-Regel**

**Überschuss positiver**  
**Ladungsträger auf dieser Seite**



**Überschuss negativer**  
**Ladungsträger auf dieser Seite**

Hallkonstante

$$[R_H] = \left[ \frac{1}{n_e q} \right] = \left[ \frac{\text{m}^3}{\text{C}} \right]$$

$$U_H = R_H \frac{I_e B_M}{h}$$

Hallspannung  $U_H$  = Hallkonstante materialspezifisch  $R_H$   $\frac{\text{Strom Magnetfeld } I_e B_M}{\text{Dicke des Leiters } h}$

Misst man in Magnetfeld die elektrischen Potentiale senkrecht zur Richtung des Stroms, ergibt sich ein Spannungsabfall



## Diagnose

- Hallkonstante ist Materialkonstante (Cu:  $-5.3 \cdot 10^{-11} \text{m}^3/\text{C}$ , Ag:  $-9.0 \cdot 10^{-11} \text{m}^3/\text{C}$ , Al:  $+9.9 \cdot 10^{-11} \text{m}^3/\text{C}$ )
- Halleffekt detektiert schwächste magnetische Felder
- Nachweissensor von magnetischen Feldern im Smartphone

# Hallsensoren

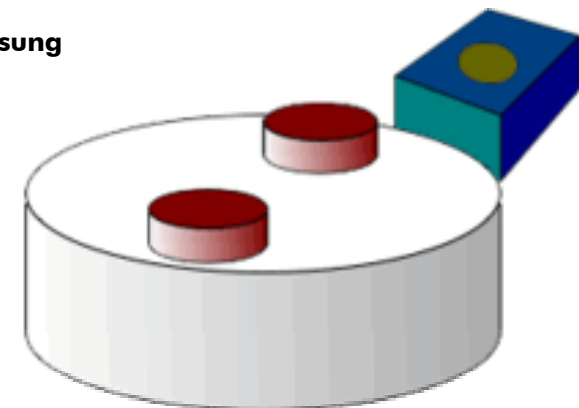
Material	$R_H$ in $\text{m}^3/\text{C}$	$u$ in $\text{m}^2/\text{Vs}$
Kupfer	$- 5,3 \cdot 10^{-11}$	$+ 3,1 \cdot 10^{-3}$
Silber	$- 8,9 \cdot 10^{-11}$	$+ 5,6 \cdot 10^{-3}$
Bismut	$- 5,0 \cdot 10^{-7}$	$+ 4,0 \cdot 10^{-1}$
Indium-Arsenid	$- 1,0 \cdot 10^{-4}$	$+ 2,7$
Cadmium	$+ 6,0 \cdot 10^{-11}$	$- 0,8 \cdot 10^{-3}$
Zink	$+ 1,0 \cdot 10^{-10}$	$- 1,7 \cdot 10^{-3}$



Magnetfeldmessung  
im Smartphone

## Einsatz des klassischen Halleffekts in der Sensorik

- Strommessung
- Drehzahlmessung
- berührungslose Signalgeber
- Schichtdickenbestimmung
- elektrischer Kompass



# von Klitzing 1980 Naturwiderstand



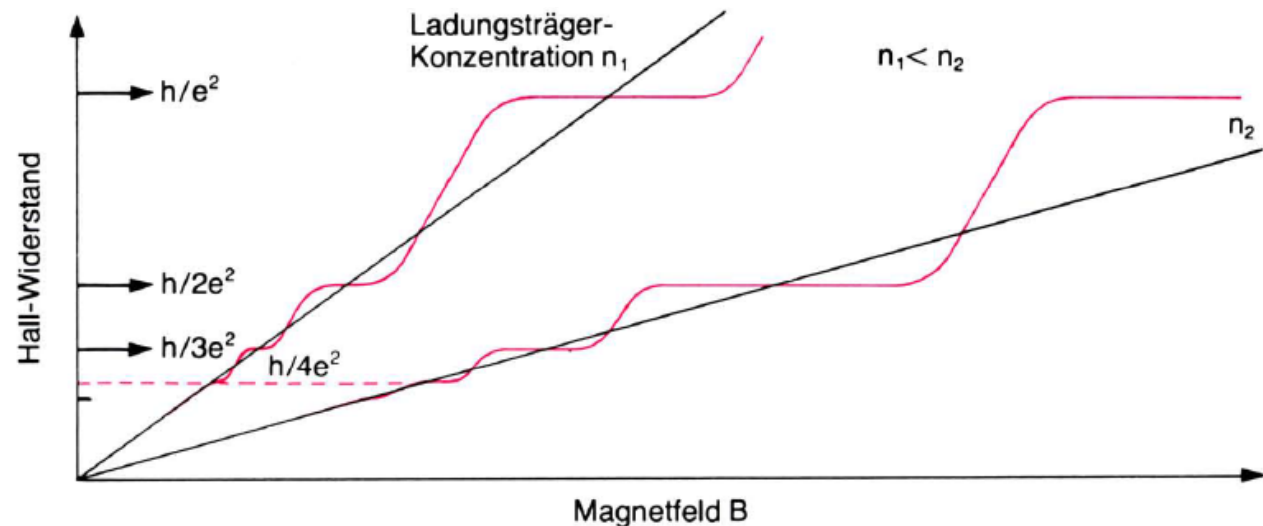
## Symptome

- bei makroskopisch dickem Leiter ändert sich Hallspannung kontinuierlich mit Magnetfeldstärke
- Elektronenbewegung eingeschränkt auf mikroskopisch (nm) dünne Schicht
- Bildung eines zweidimensionalen Elektronengases
- experimentell **NOTWENDIG** sind starkes Magnetfeld (20 T) und niedrige Temperaturen (etwa K)

$$R_H \approx \frac{\text{Magnetfeldstärke } B_M}{\text{Ladungsträgerdichte } n_e}$$

von-Klitzing-Konstante

$$R_K = \frac{h}{e^2} = 25812.807 \Omega$$

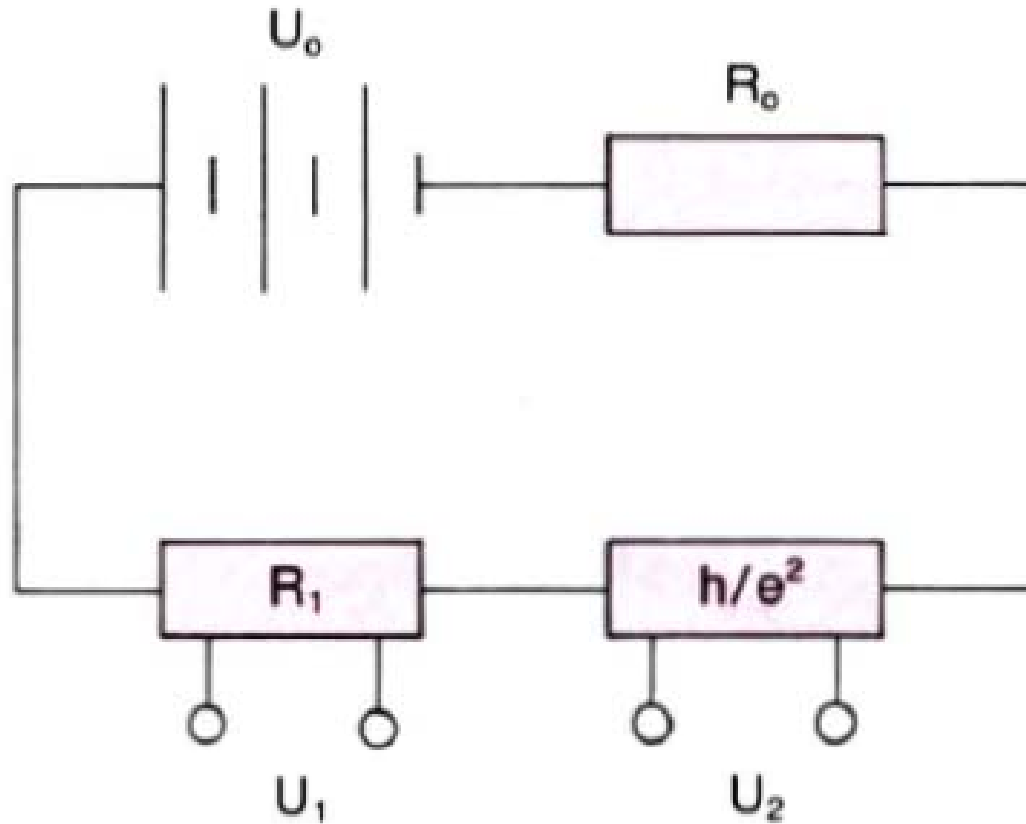


## Diagnose

- man findet Intervalle in Magnetfeldstärke, in denen sich Hall-Spannung nicht ändert
- Strom fließt hier scheinbar ohne Reibungsverluste
- zugehöriger Hall-Widerstand ist Kandidat für Widerstandsnorm
- $h/e^2$  entspricht (bis auf numerische Konstante) der Feinstrukturkonstante  $1/137$
- Feinstrukturkonstante vergleicht Elektronengeschwindigkeit um Proton in Wasserstoff mit  $c$
- Feinstrukturkonstante beschreibt Kopplung zwischen Atom und Licht

# von Klitzing 1980 Naturwiderstand

Prinzipieller Aufbau zur Messung des quantisierten Hall-Widerstands

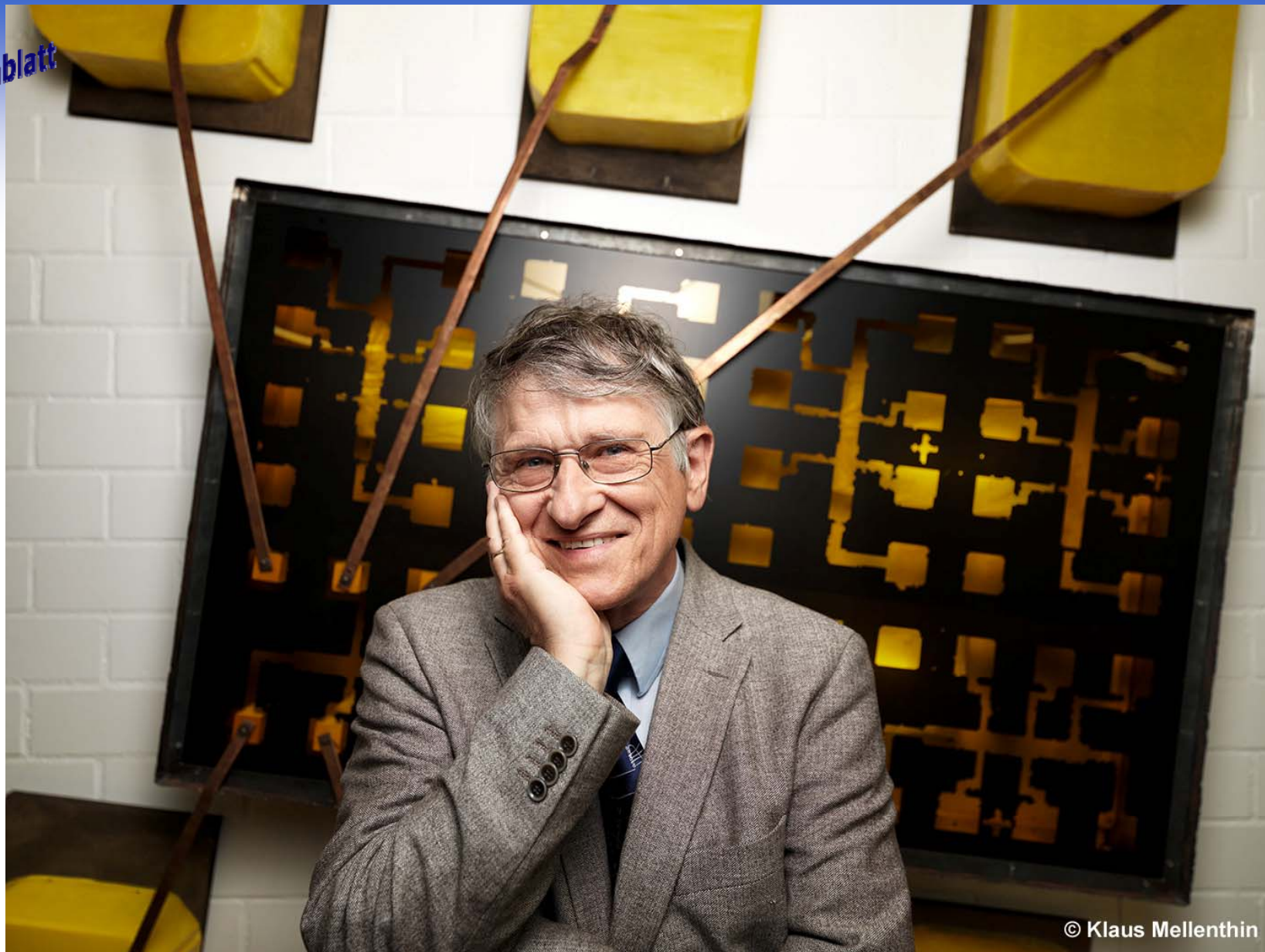


$$\frac{h}{2e^2} = \frac{U_2}{U_1} R_1$$

## Diagnose

- zur Bestimmung des Wertes  $h/e^2$  sind zwei Messungen notwendig
- in erster Messung wird Verhältnis  $U_2/U_1$  bestimmt
- in der zweiten Messung bestimmt man den Wert von  $R_1$

Extrablatt

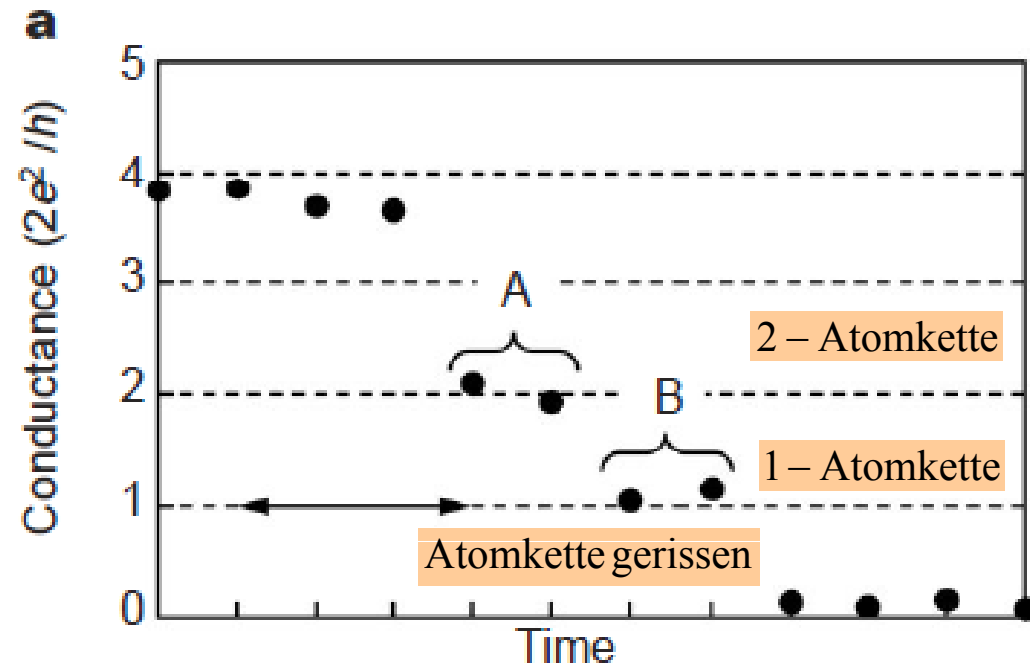
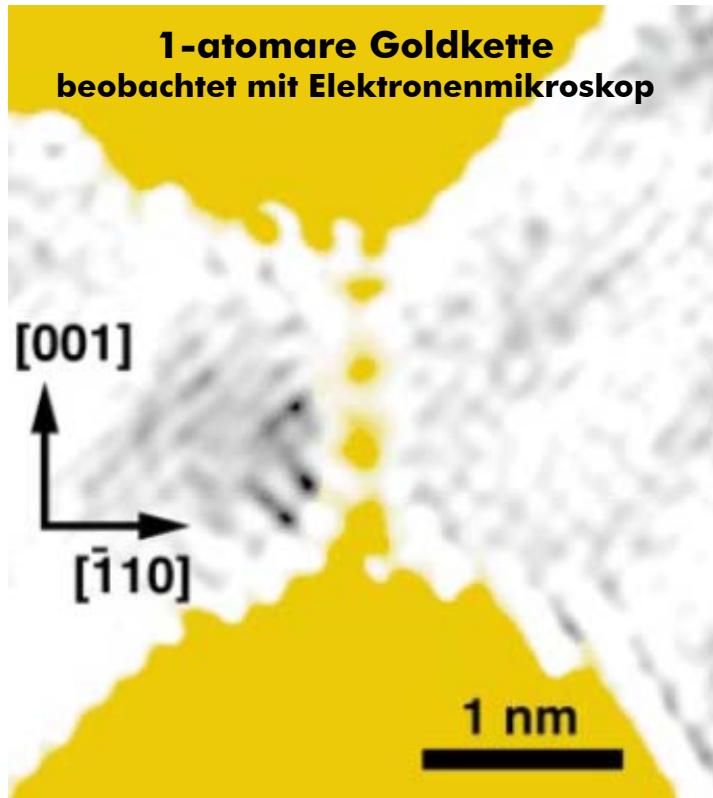


**The Nobel Prize in Physics 1985 was awarded to Klaus von Klitzing  
for the discovery of the quantized Hall effect**

# Quantisierter Ohmscher Widerstand Atomare Ketten

## Symptome

Zieht am Draht immer weiter auseinander, bildet sich schließlich atomare Kette



## Diagnose

- Stromfluss durch atomare Drähte kann gemessen werden
- dabei zeigt sich Quantisierung elektrischer Leitfähigkeit in eingeschränkten Dimensionen

# Thema Festkörper Supraleitung



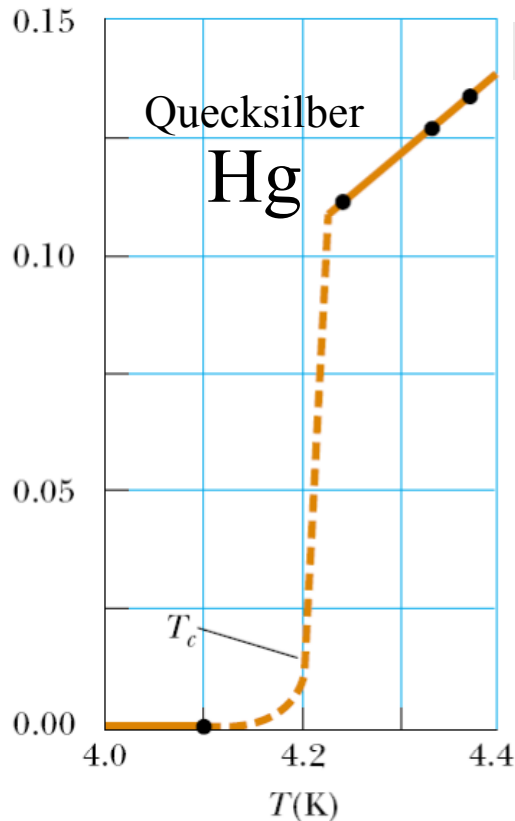


# kein messbarer elektrischer Widerstand Supraleiter

## Symptome

- linearer Anstieg des Widerstands bei höheren Temperaturen
- Verhalten bei hohen Temperaturen entspricht dem metallischen Leiters

$R(\Omega)$



typisches Widerstandsverhalten eines Supraleiters als Funktion der Temperatur

spezifischer Widerstand eines Supraleiters

$$\rho^{SL} = 4 \cdot 10^{-25} \Omega \cdot \text{m}$$

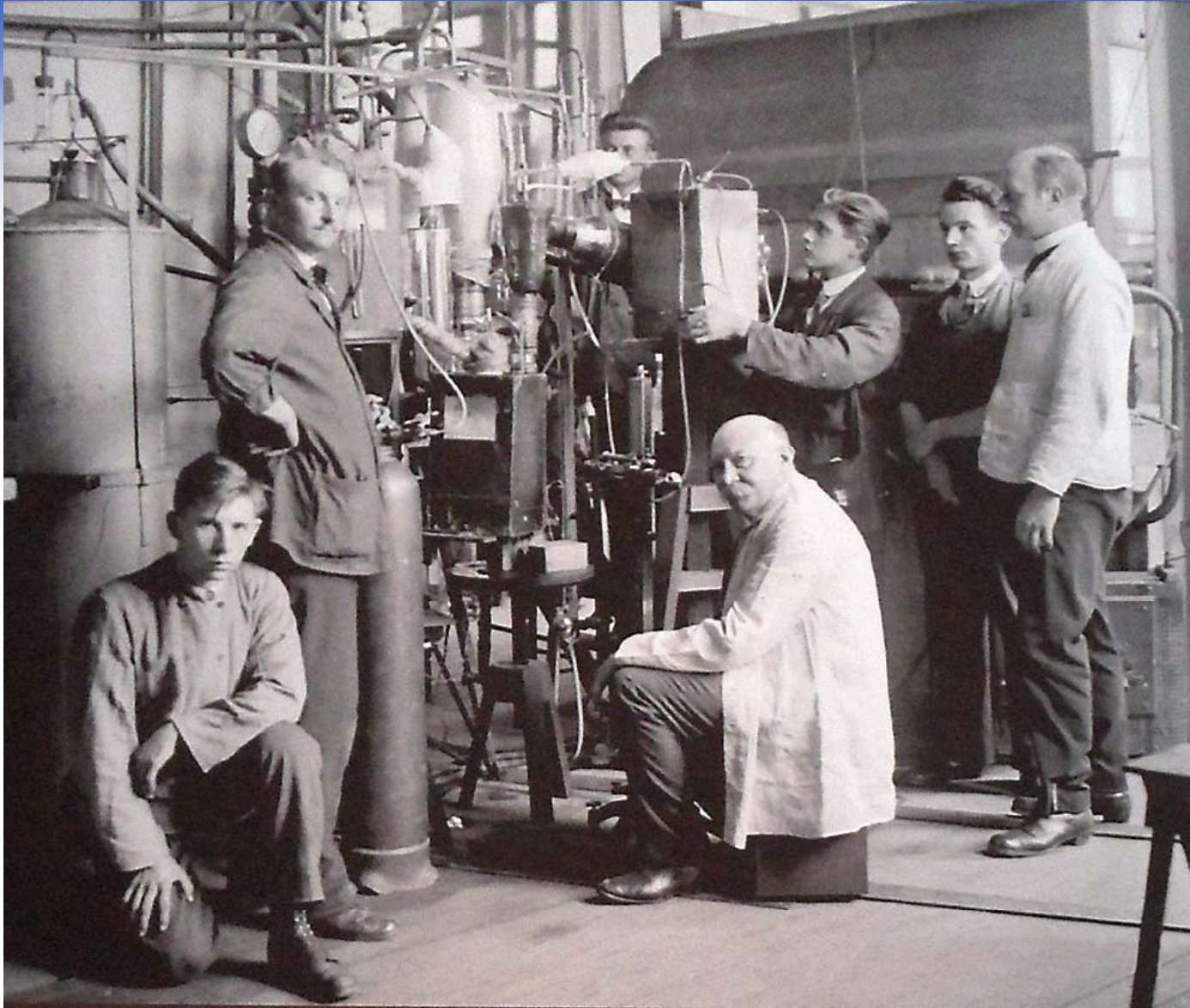
Draht der Länge eines Lichtjahres hat elektrischen Widerstand von 4 n $\Omega$

Vergleich der spezifischen elektrischen Widerstände

$$\frac{\rho^{Cu}}{\rho^{SL}} = \frac{1.72 \cdot 10^{-8} \Omega \cdot \text{m}}{4 \cdot 10^{-25} \Omega \cdot \text{m}} \approx 10^{17}$$

## Diagnose

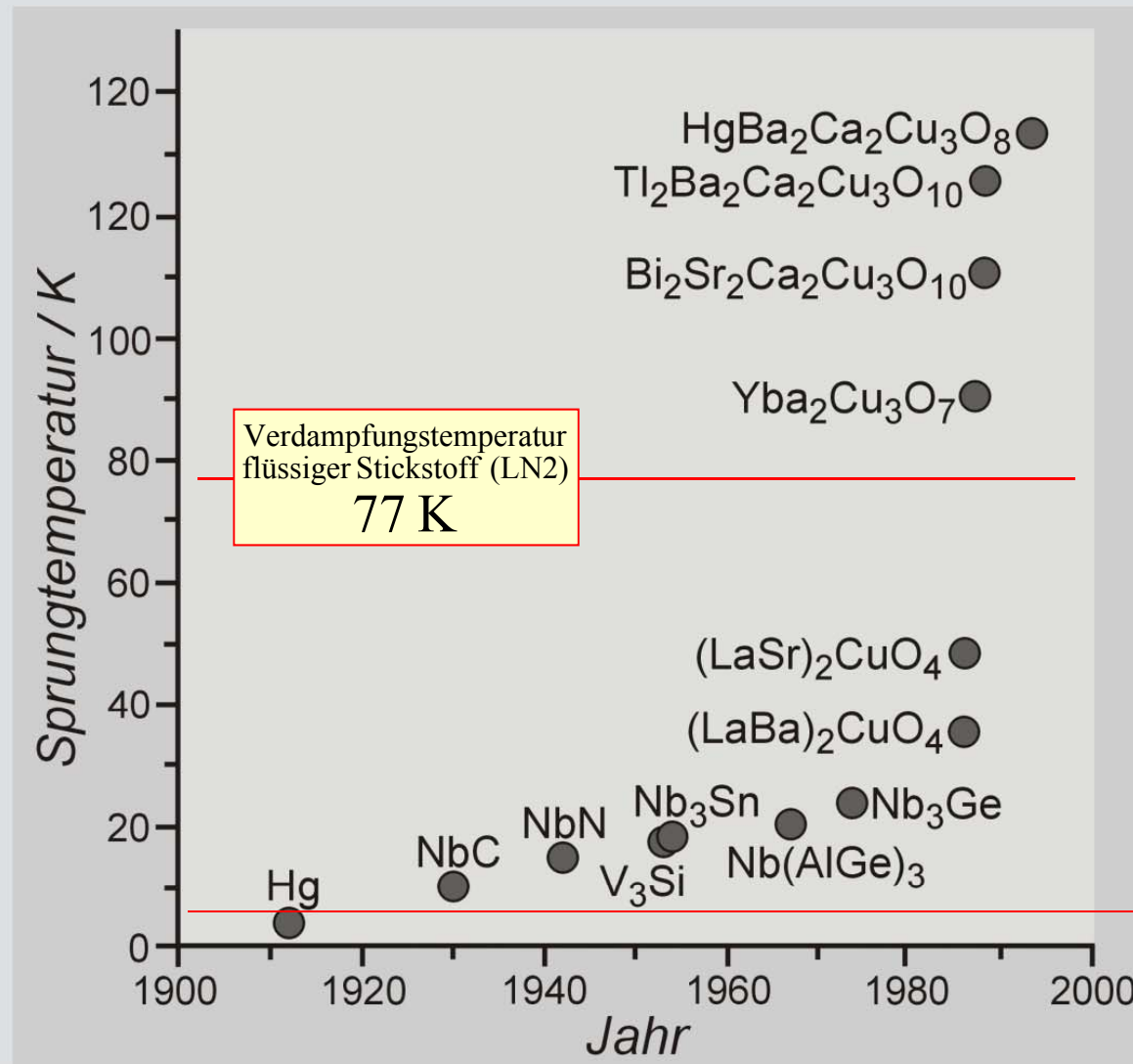
- unterhalb bestimmter Temperatur sinkt Widerstand auf nicht messbaren Wert
- spezifischer Widerstand eines Supraleiters ist praktisch NULL



**The Nobel Prize in Physics 1913 was awarded to Heike Kamerlingh Onnes for his investigations on the properties of matter at low temperatures which led, inter alia, to the production of liquid helium**

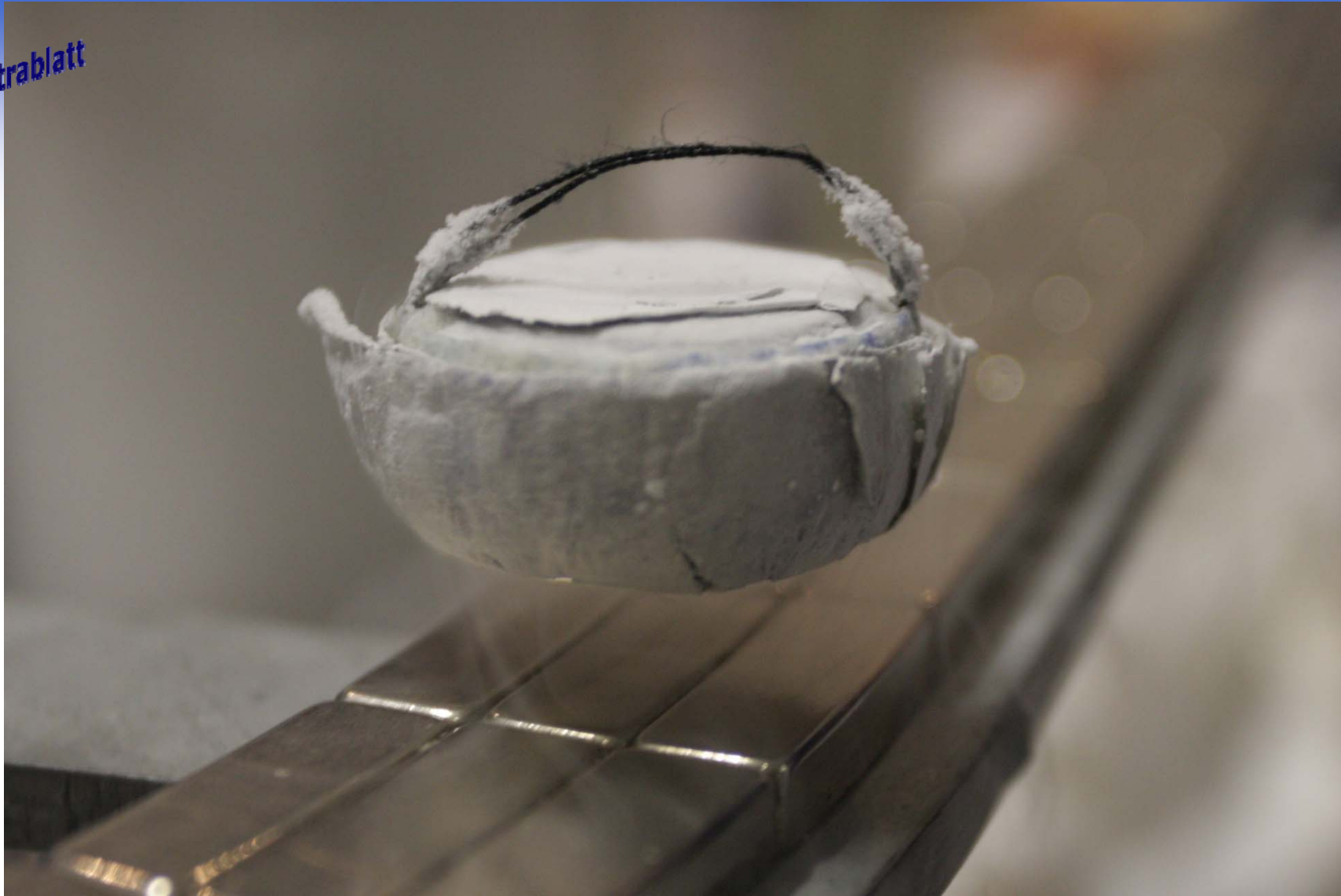


## Entwicklung der Sprungtemperaturen von Supraleitern



### Diagnose

Technische Anwendung in Sichtweite, wenn Sprungtemperatur höher als 77K (LN2-Temperatur)



**The Nobel Prize in Physics 1987 was awarded jointly to  
J. Georg Bednorz and K. Alexander Müller  
for their important break-through in the discovery of superconductivity  
in ceramic materials**

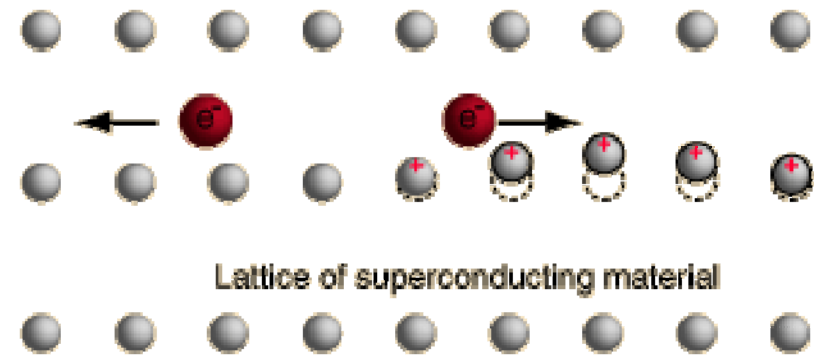
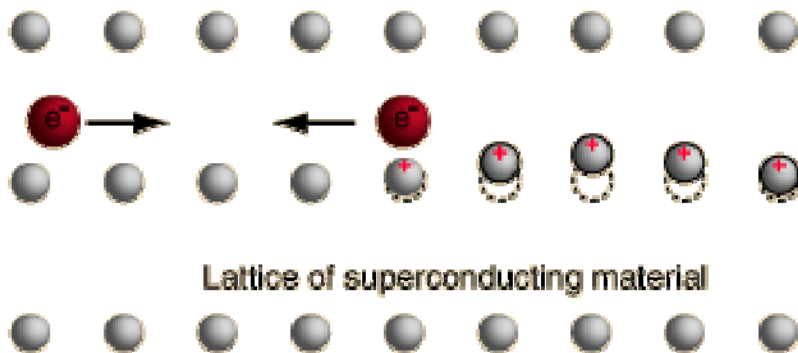
# Leon Cooper 1956

## Theorie der Supraleitung

### Symptome

- Elektronen erfahren im Kristallgitter eines Metalls geringe ANZIEHUNG
- Vermittlung über positiv geladene Gitteratome
- für Elektronen energetisch von Vorteil sich zusammenzuschließen (Cooper-Paar)

vorbei fliegendes Elektron zieht Gitteratome an und bewirkt leichten Ripple entlang des Pfades



in Gegenrichtung vorbeifliegendes Elektron wird durch Ladungsverschiebung angezogen

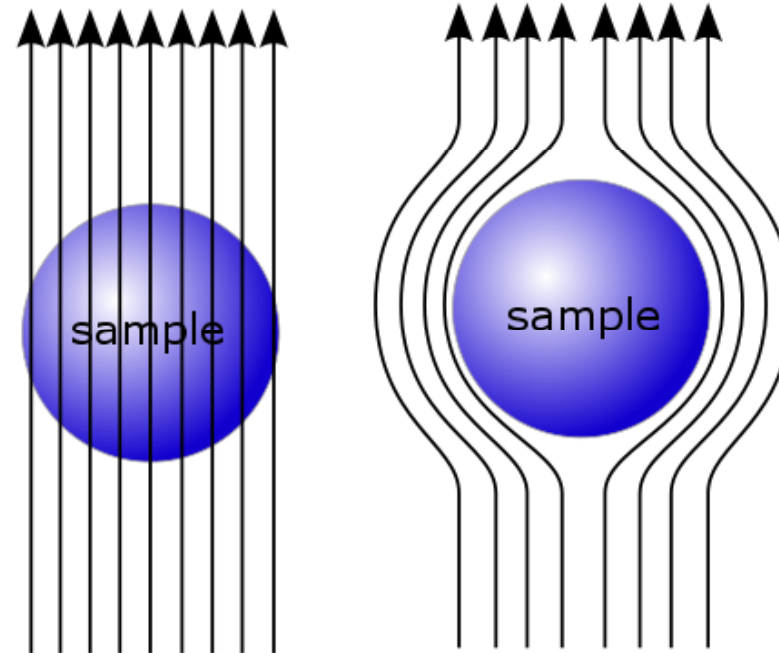
### Diagnose

- Elektronen haben entgegengesetzte Geschwindigkeit (Boson mit Gesamtimpuls NULL)
- scharf definierter Impuls der Elektronen bedeutet erhebliche Ortsausdehnung (Heisenberg)
- Wechselwirkung mit Millionen anderer Cooperpaare (dynamische kurzlebige Paarbildung)
- Cooperpaare kondensieren in supraleitenden Zustand (vgl. BEC)



# Supraleitung Levitation

Magnetic field lines due to presence of magnet.



Normal material

Superconductor



Para- vs Diamagnetismus

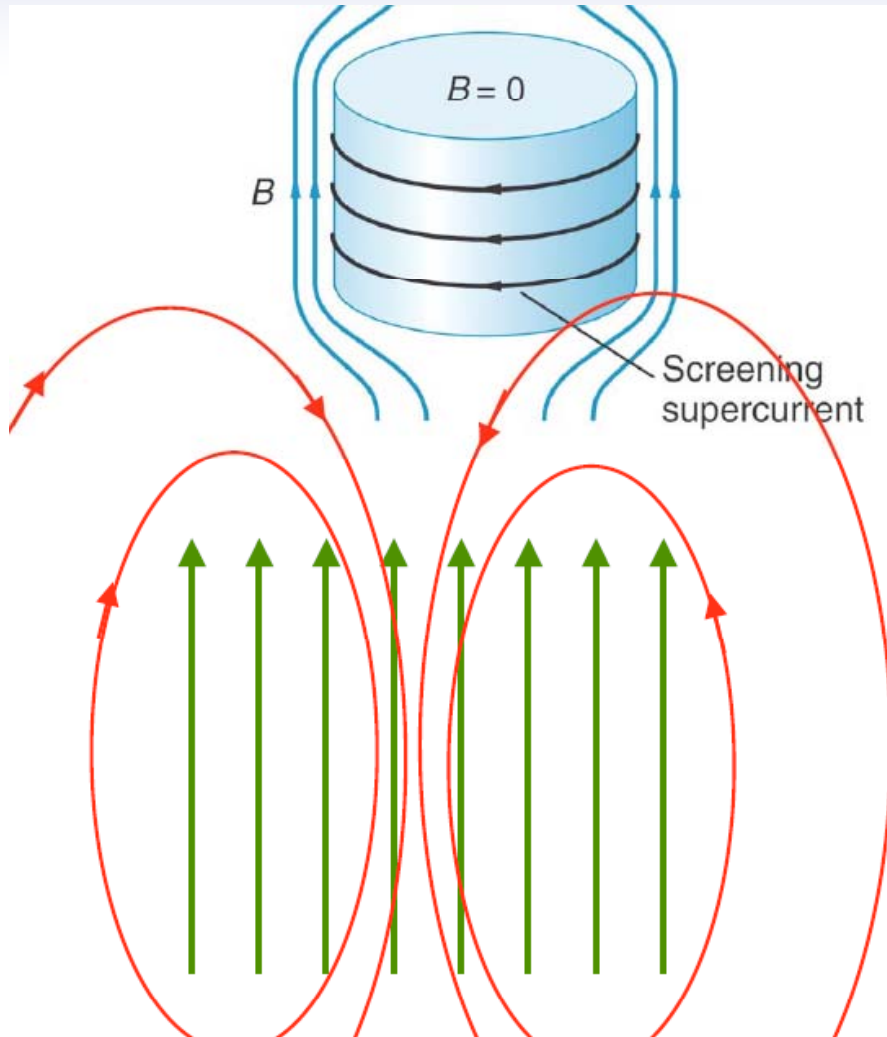
## Diagnose

- Superposition von Magnetfeldern
- Supraleiter erzeugt entgegengesetztes Magnetfeld
- Magnetfeld stellt sich so ein, dass Feldstärke im Innern des Supraleiters **NULL**
- Supraleiter schirmt Magnetfelder ab
- Verhalten also qualitativ ähnlich zu diamagnetischen Stoffen



# Supraleitung

## Meichsner-Ochsenfeld Effekt



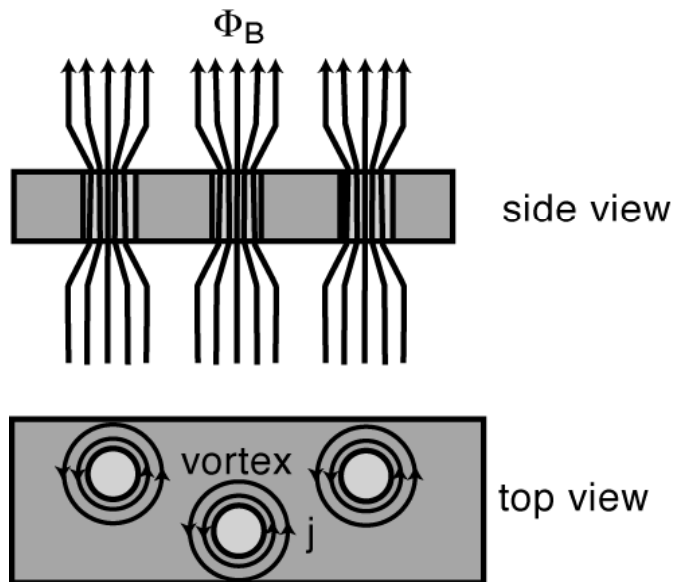
Supraleitungs  
Schwebbahn

**Diagnose**  
**Permantmagnet über Material in supraleitendem Zustand schwebt**

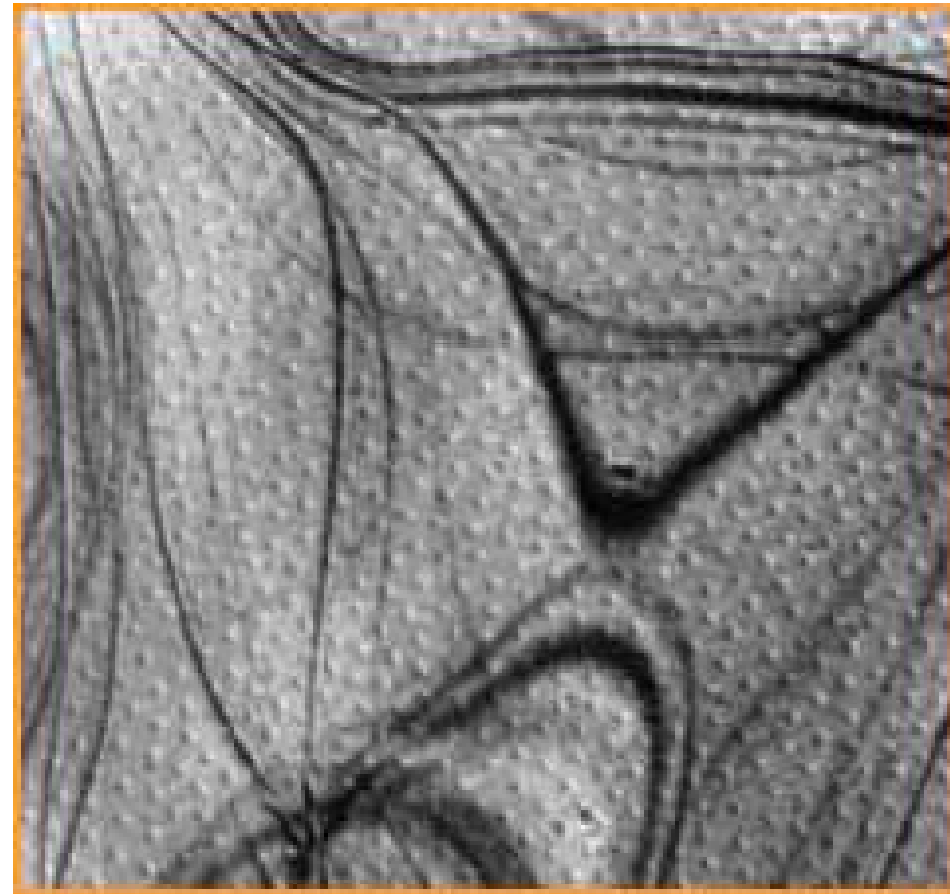
# Lorentzmikroskop Quantenwirbel

## Symptome

- induzierter Kreisstrom schirmt äußeres Magnetfeld von Supraleiter ab
- Magnetfeld dringt in Supraleiter ein, wenn kritischer Abschirmstrom überschritten



Magnetfeld durchdringt Supraleiter



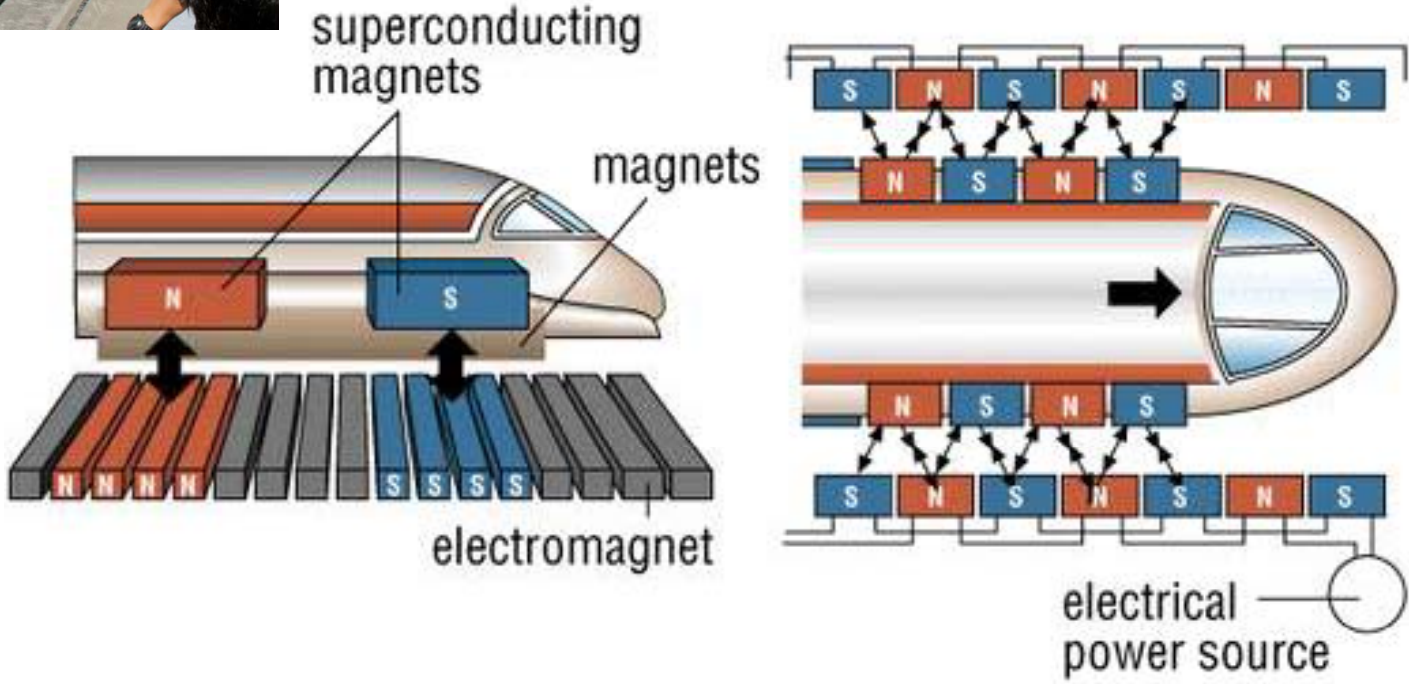
## Diagnose

Quantisierter magnetischer Fluss sichtbar gemacht in speziellem Elektronenmikroskop

# Supraleitung MagLev

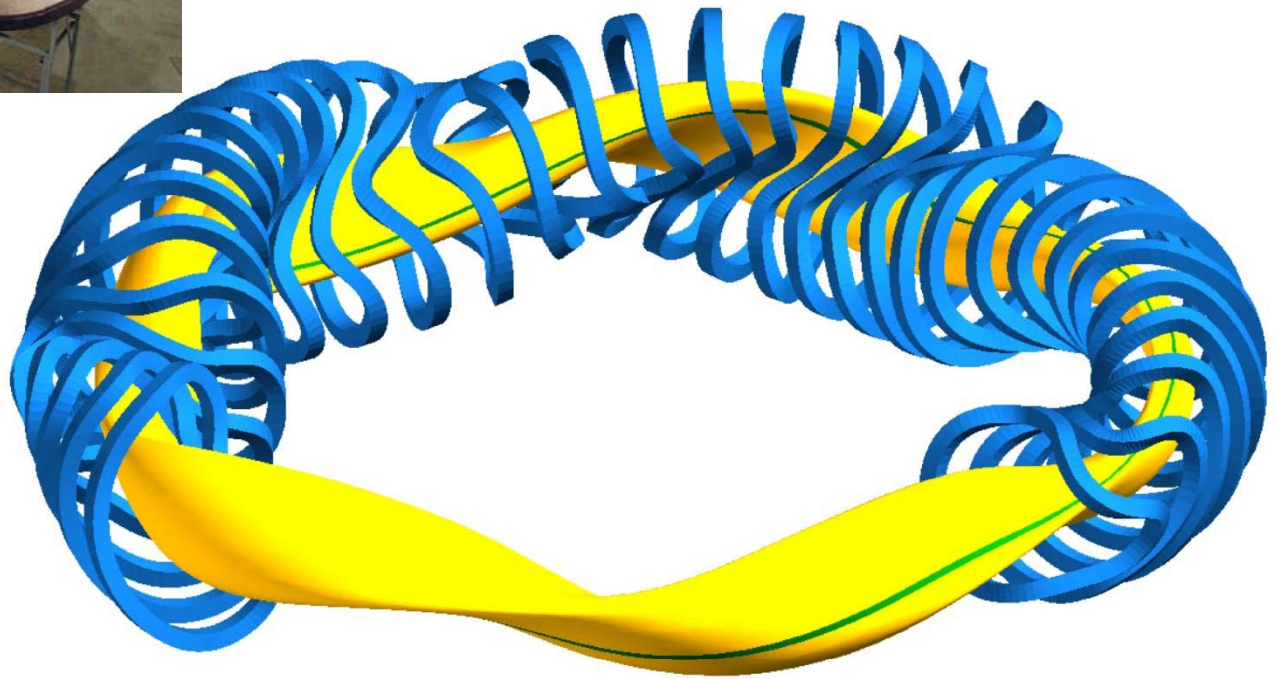


The Maglev L0 will run between Tokyo and Nagoya at speeds reaching 311 mph - fast enough to cut a 4.5 hour drive down to a mere 40 minutes. That's pretty dang fast



**Diagnose**  
**Einsatz supraleitende Spulen in Hochgeschwindigkeits-Magnetschwebbahnen**

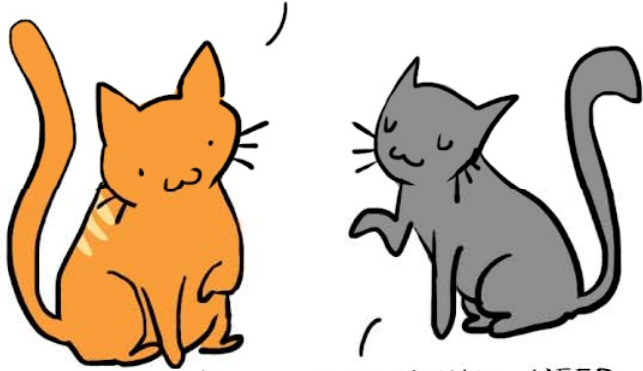
# Greifswald Fusionsexperiment Wendelstein 7X



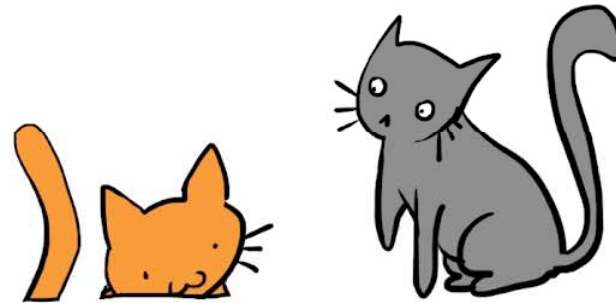
**Diagnose**

**Erzeugung starker Magnetfelder durch supraleitende Spulen für Fusionsexperiment**

DID YOU KNOW?  
THERE IS A NON ZERO PROBABILITY  
FOR ME TO GO THROUGH THE  
FLOOR DUE TO TUNNEL EFFECT.



YEAH, BUT YOU'LL NEED  
MORE TIME THAN THE AGE OF THE  
UNIVERSE TO MAKE IT HAPPEN

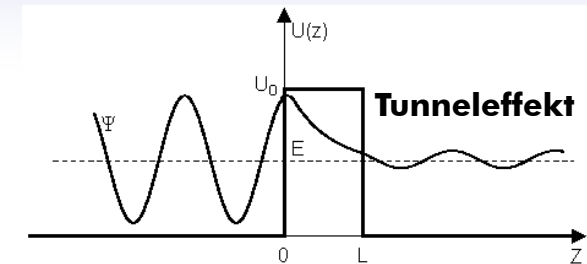


# Sandwich-Physik

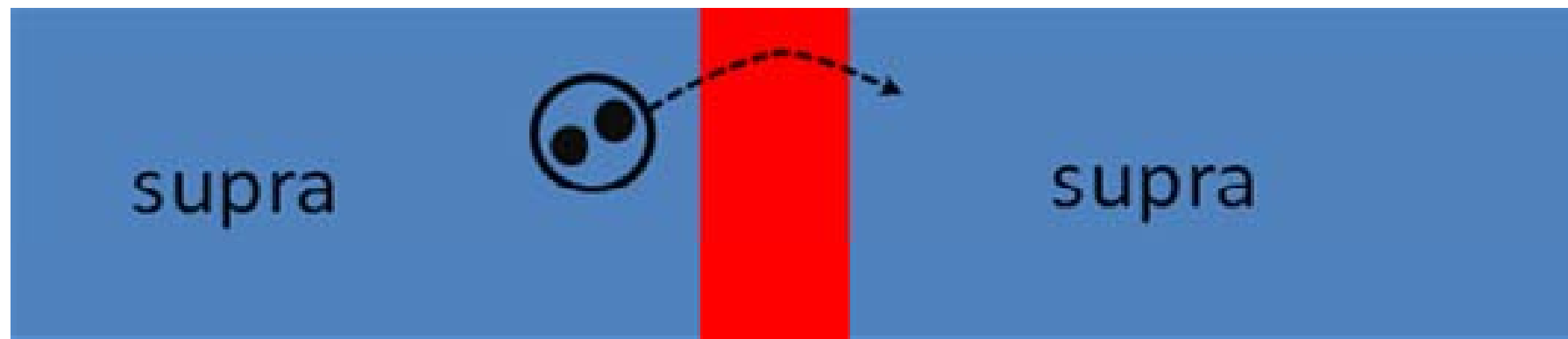
## Josephson-Effekt

### Symptome

- Supraleiter sind durch hauchdünne Isolatorschicht getrennt
- Cooper-Paare können durch Isolator tunneln
- Theorie sagt Tunnelstrom OHNE Anlegen einer Spannung voraus



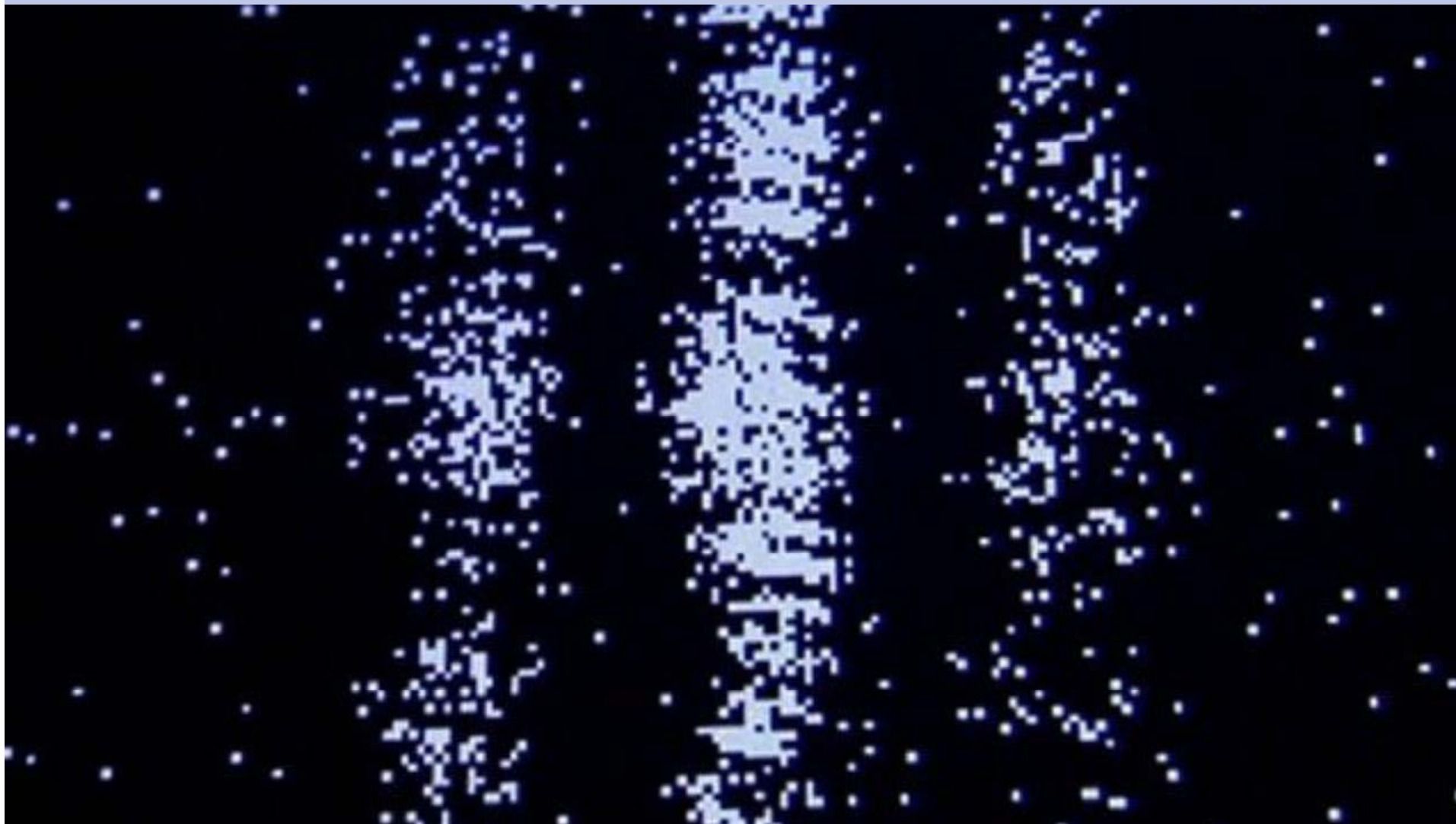
$d_{\text{Josephson junction}} \approx \text{nm}$



isolant

### Diagnose

- Kombination aus Magnetfeld und Gleichspannung erlaubt hochpräzise Messung von  $h/e$
- hochempfindlicher Sensor für elektrische Spannungen und magnetische Felder

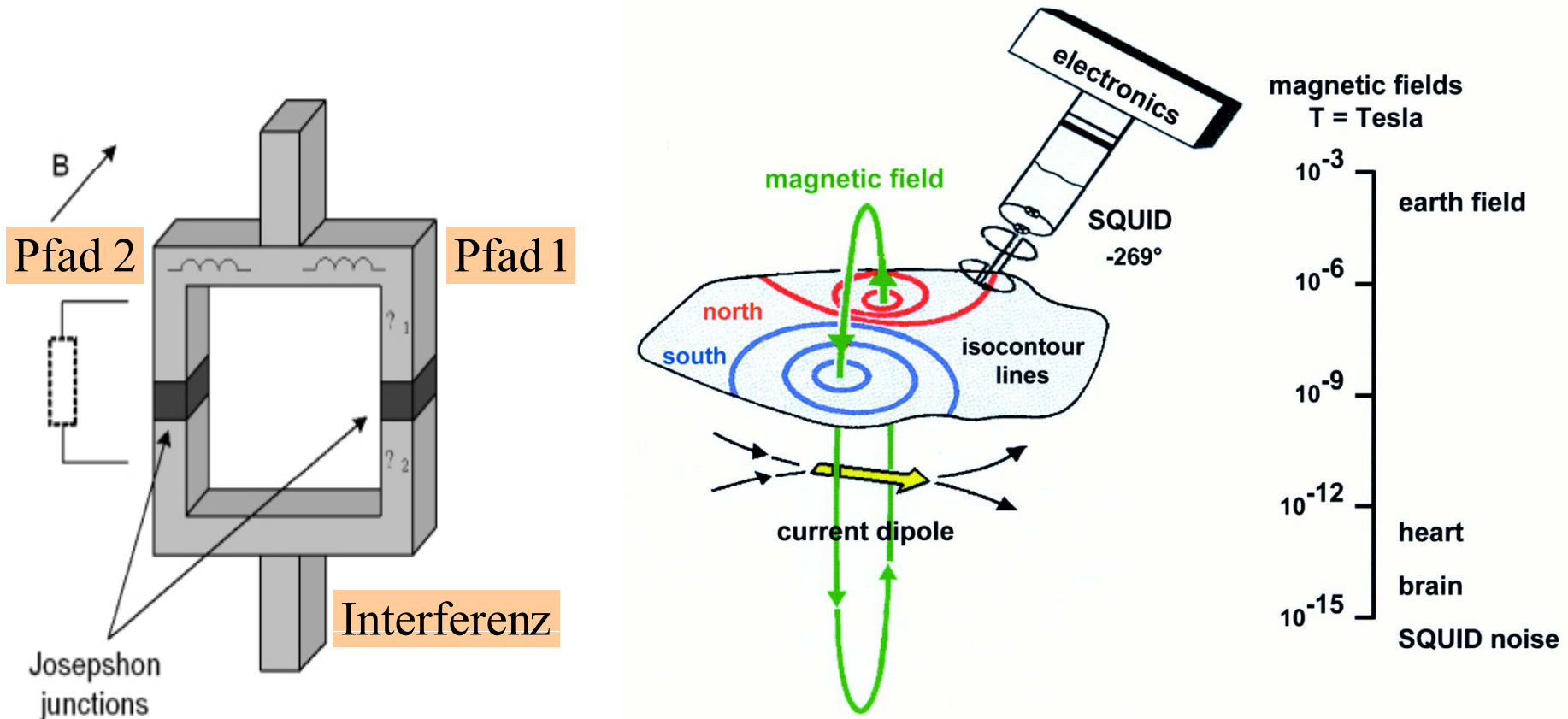


**Youngsches Doppelspaltexperiment mit Elektronen zeigt den Wellencharakter der Materie**

# Superconducting-quantum-interference-device SQUID

## Symptome

Cooper-Paar Materiewelle ist kohärent und führt zu Interferenzphänomen



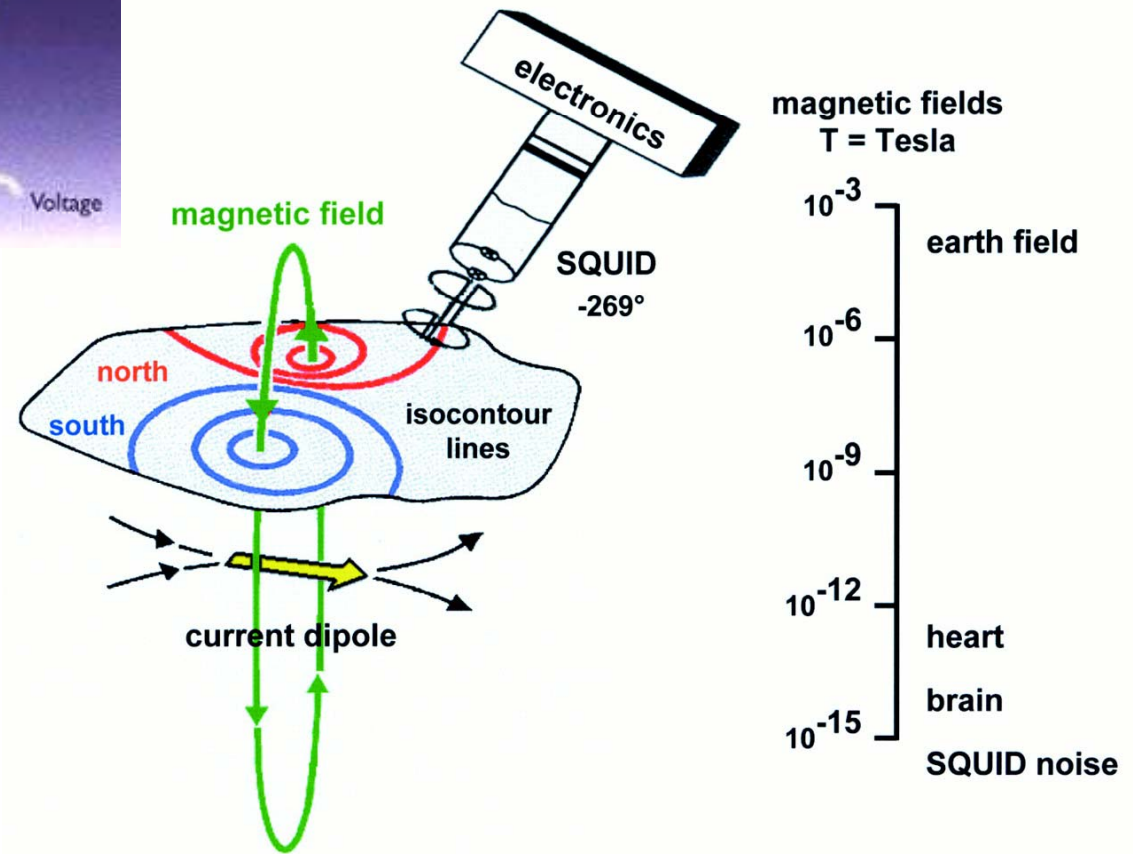
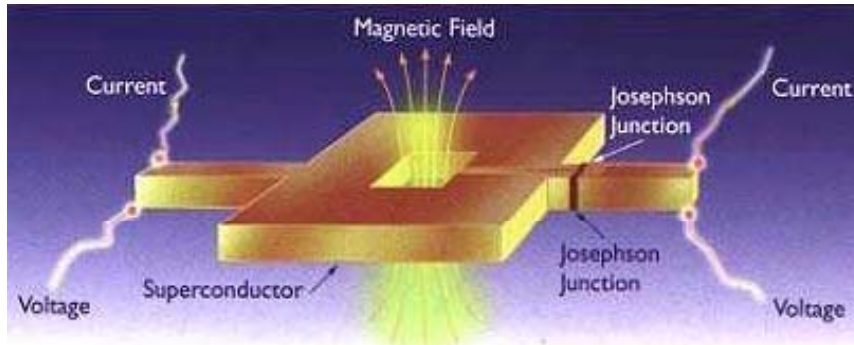
## Diagnose

- SQUID bietet Materiewellen zwei gleichberechtigte Wege an (vgl Youngscher Doppelspalt)
- Phasendifferenz ist abhängig von äußerem magnetischen Fluss
- hochsensitive Messung geringster magnetischer Felder im Bereich von fT ( $10^{-15}$  T)

# Superconducting-quantum-interference-device SQUID

Symptome

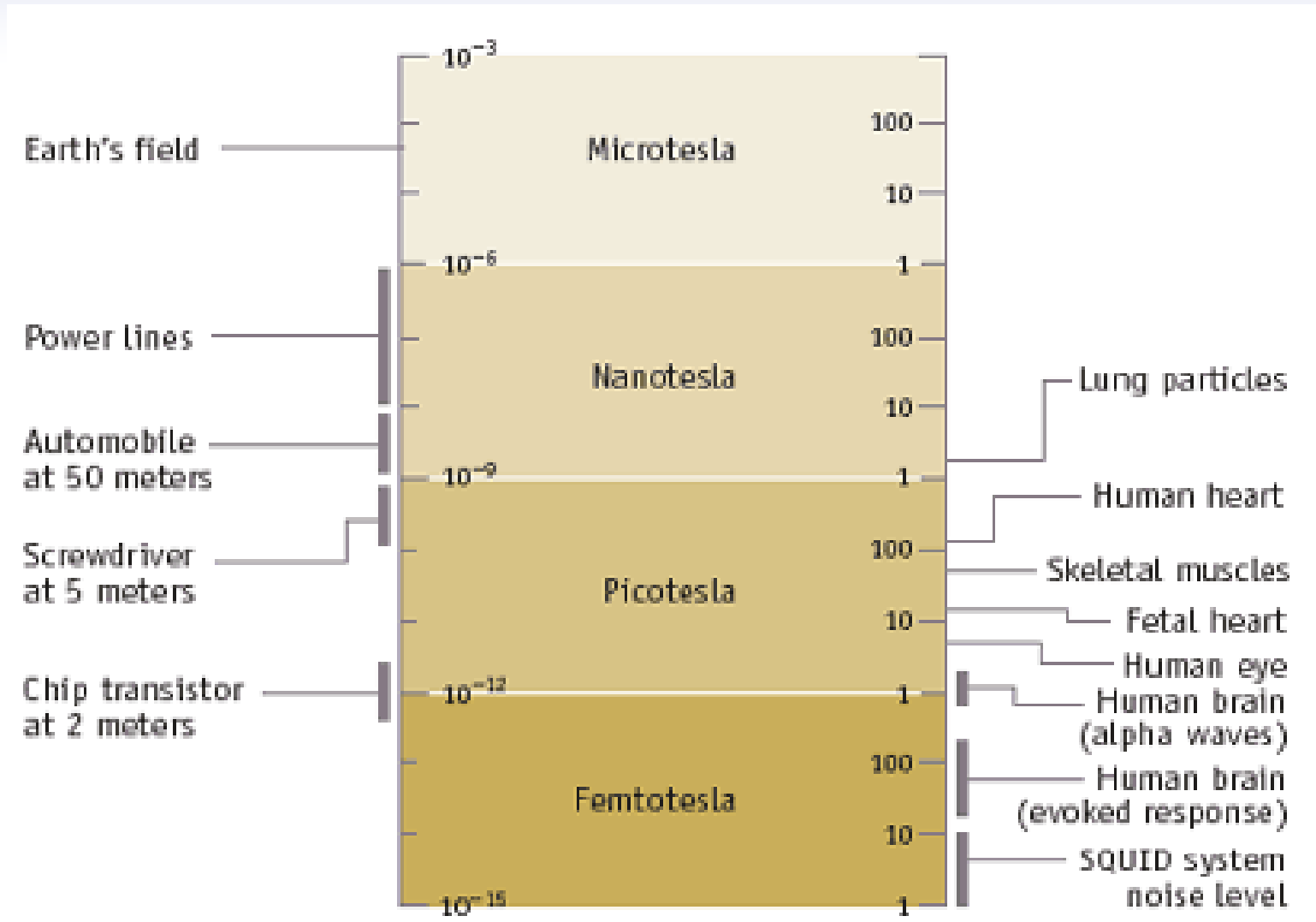
Phasendifferenz ist abhängig von äußerem magnetischen Fluss



Diagnose

Hochsensitive Messung geringster magnetischer Felder im Bereich von fT ( $10^{-15}$  T)

# physikalisch relevant Magnetfelder

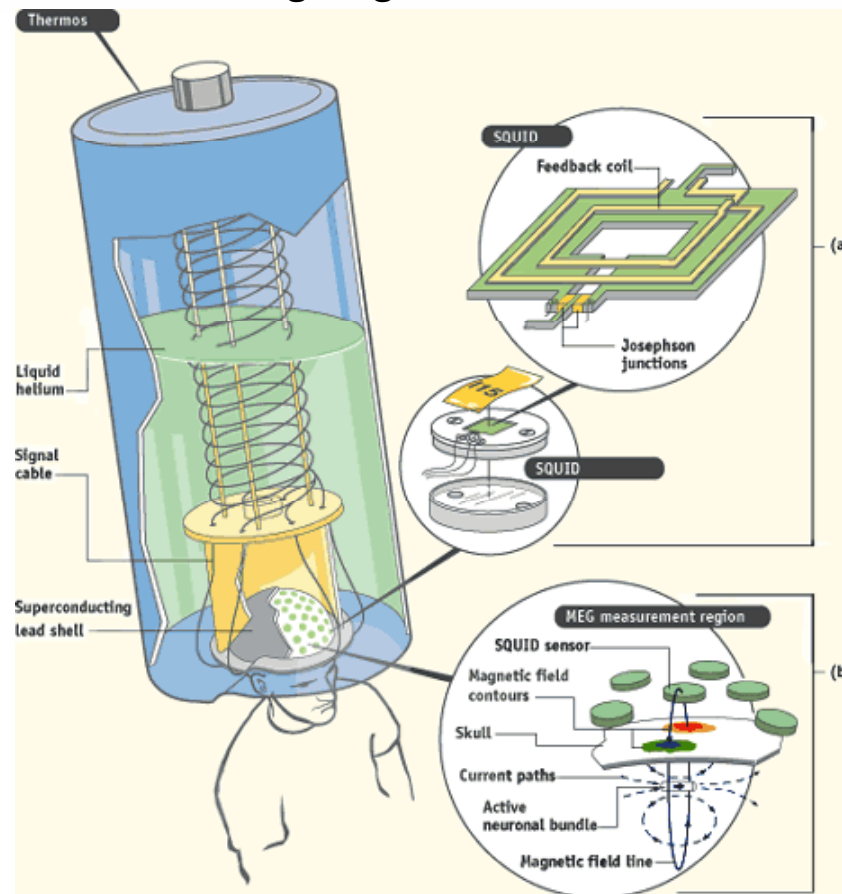


# SQUID für die Medizin

## Magneto-Enzephalographie

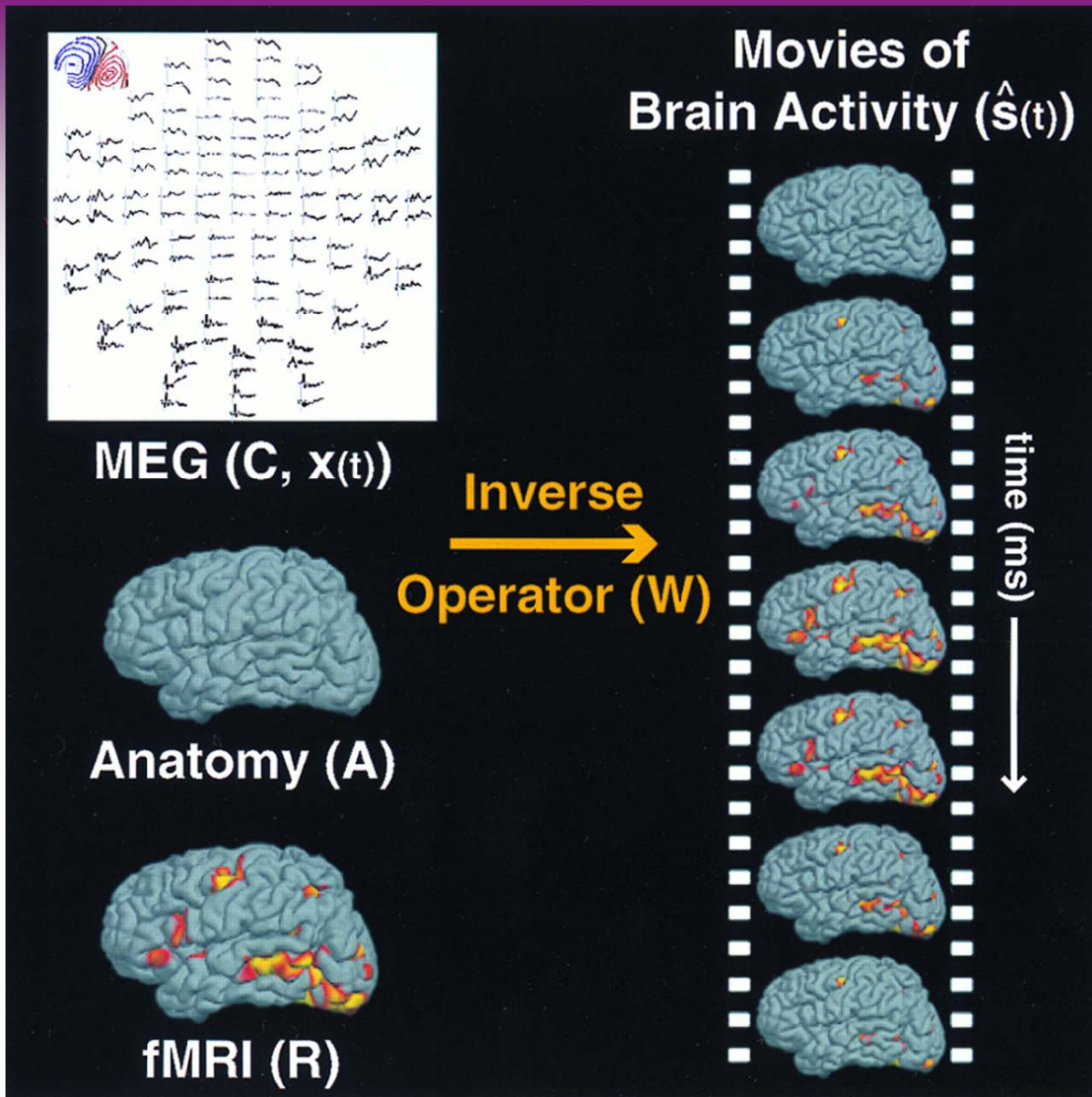
### Symptome

- elektrischen Ströme aktiver Nervenzellen im Gehirn verursachen magnetische Signale
- magnetischen Signale des Gehirns betragen nur wenige Femtotesla
- äußere Störungen möglichst vollständig abgeschirmt werden.



### Diagnose

Magneto-Enzephalographen haben sowohl hohe räumliche als auch zeitliche (ms) Auflösung



Diagnose

Magneto-Enzephalographen haben sowohl hohe räumliche als auch zeitliche (ms) Auflösung

Spatiotemporal imaging of human brain activity using functional MRI constrained magnetoencephalography data: Monte Carlo simulations  
Arthur K. Liu et al. PNAS 95, 8945 (1998)