Übung 1.1-1

Schnelle Fragen zu

1.1 Grundlagen der Materialwissenschaft

- Finde einige Materialien, deren Eigenschaften trotz identischer oder zumindest fast identischer Zusammensetzung stark unterschiedlich sein können.
  - Spekuliere über Bedeutung und Anwendungen dieser Materialien.
- Zerlege in Gedanken einen flachen Bildschirm (es gibt drei oder sogar vier Grundtypen).
  - Beschreibe Aufbau und Grundfunktion, insbesondere in Hinblick auf Schlüsselmaterialien.
- Beschreibe das Prinzip des Plattenspeichers im ***PC***.
  - Bedenke kurz die Entwicklung der Speicherkapazität über die Zeit und betrachte dabei die Entwicklung des Lesekopfes.
  - Meditiere über die Frage, ob man die Revolution bei Leseköpfen vor nicht allzu langer Zeit als Indiz für das Ende der klassischen ET und als Paradigma für das Zusammenwachsens von **ET** und **MaWi** sehen kann.
- Warum regen sich derzeit (Okt. 2010) alle Medien darüber auf, dass "die Chinesen" das Monopol für "seltenen Erden" (z. B. haben und Ausfuhrrestriktionen die Wirtschaft der westlichen Länder gefährdet?
- Vervollständige und erläutere die Tabelle aus dem Skript:
  - Was fehlt eventuell? Wofür sind die genannten Materialien gut? Betrachte zumindest die rot markierten.

Wichtige Kristalle in der Elektrotechnik		
Halbleiter	**Metalle / Leiter**	**Sonstige**
Si, **GaAs**, **InP**, **GaP**, **GaN**, **Ge**, ... "**CIS** " (**$CuInSe_2$**), **CdTe**, ... **SnO_2**, **ZnO**, ...	**Cu**, **Al**, **Ag** (Legierungen) für "Drähte" **Au**, **W**, **Ta**, ... für spezielle Bauelemente **Fe**, **Ni**, **Co** (Legierungen); **Co_5Sm**, **$Nd_2Fe_{14}B$** , ... für "magnetische" Anwendungen. **$TaSi_2$**, **$NiSi_2$** , .. für Chips **ITO** (Indium -Tin-Oxide"), ...	Dielektrika Ferroelektrika Piezomaterialien "Schwingquarze" Materialien für Widerstände und Heizer (z.B. Graphit) Glimmer (?) Alle kristallin, oft Keramiken

Wichtige amorphe Materialien in der Elektrotechnik		
Halbleiter	**Kunststoffe**	**Sonstige**
Amorphes **Si** (Solarzellen) Organische Halbleiter ("***OLED***")	**PVC**, Teflon, ... Isolation und "low ϵ" Leitende Polymere	Photolacke ("Resists") für Chip- und Platinenherstellung. Glas ("Bildröhre")

Richard Feynman (1918 – 1988)

Advanced

- Richard Feynman war eine der bedeutensten Physiker der Mitte des **20.** Jahrhunderts und außerdem eine Art Unikum und Universalgenie.
  - Mehr zum Zeitvertreib entschlüsselte er Maja-Zahlensysteme, begann zu zeichnen und zu malen (auch schon mal im Auftrag ein Gemälde für ein Bordell), trieb sich in den Spielhöllen von Las Vegas herum, machte Musik mit der Bongo-Trommel (durchaus professionell), knackte Tresore in Los Alamos beim Bau der Atombombe, schrieb novellistische Bestseller und hatte alles in allem viel Spaß. Den Nobelpreis bekam er **1965**.
- Außerdem war er ein passionierter Lehrer, der gerne Studierende um sich herum hatte. Eine Passage aus " *Surely you're joking, Mr. Feynman!*" (s.u.) liest sich (in freier Übersetzung) so:

> Ich glaube nicht, daß ich wirklich auf das Unterrichten verzichten kann. Der Grund ist, daß ich etwas haben muß, damit ich, wenn ich keine Ideen habe und nicht weiterkomme, mir sagen kann: "Wenigstens lebe ich, wenigstens *tue* ich etwas; ich leiste einen Beitrag" – das ist einfach psychologisch.
> Als ich in den 1940er Jahren in Princeton war, konnte ich sehen, was mit den großen Köpfen am Institute for Advanced Study geschah, die speziell wegen ihrer enormen Intelligenz ausgewählt worden waren und nun die Gelegenheit erhielten, in diesem schönen Haus am Wald zu sitzen, ohne Unterricht zu geben, ohne irgendwelche Verpflichtungen. Diese armen Schweine (*zu denen **Einstein** gehörte!*) können jetzt ganz alleine sitzen und klar denken, OK? So kommen sie eine Zeitlang auf keine Ideen: Sie haben jede Gelegenheit, etwas zu tun, und es fällt ihnen nichts ein. Ich glaube, daß in einer solchen Situation eine Art Depression in einem aufsteigt, und man beginnt sich Sorgen zu machen, daß man keine Ideen bekommt. Und nichts passiert. Es kommen immer noch keine Ideen.
> Es passiert nichts, weil es nicht genug *echte* Aktivität und Herausforderung gibt: Man hat keinen Kontakt zu den Experimentatoren. Man muss sich nicht überlegen, wie man die Fragen der Studenten beantwortet. Nichts!
> In jedem Denkprozeß gibt es Momente, in denen alles gut läuft und man wunderbare Ideen hat. Das Lehren ist eine Unterbrechung, und deshalb ist es die größte Qual der Welt. Und dann gibt es die *längeren* Zeiträume, in denen einem nicht viel einfällt. Man hat keine Ideen, und wenn man gar nichts tut, wird man wahnsinnig! Du kannst nicht einmal sagen: "Ich unterrichte meine Klasse."

- Anfang der **60**er Jahre las Feynman die Einführungsvorlesung für Physik im "Caltech" ("Californian Institute of Technolgy", eine der berühmtsten amerikanischen Universitäten). Aus dem "Skript" wurden die " **Feynman Lectures on Physics**", die (zumindest in englischsprachigen Raum) berühmtesten Lehrbücher in der Physik.
- Sein bekanntestes Buch, eine Art Autobiographie mit einzelnen, fast immer ziemlich komischen Episoden (die Beschreibung seiner Musterung nimmt es ohne weiteres mit der bekannten Szene aus **Thomas Manns** "*Felix Krull*" auf), war ein Bestseller. Es heißt
  - *Surely you're joking, Mr. Feynman!*
    (Bantam Books, **1985**)
  - Eine Art Fortsetzung heißt:
    What do you care, what other people think
    In diesem Buch ist Feynmans Erfahrung mit der Regierungskommission dargestellt, die er als Mitglied der Präsidialkommission bei der Untersuchung des Challenger-Unglücks in reichem Maße machen konnte.
  - Sehr empfehlenswert ist auch noch
    QED - The Strange Theory of Light and Matter
    (Princeton Science Library)
    Das Büchlein ist die gedruckte Version von vier Vorträgen über Quantenelektrodynamik, die Feynman für Laien konzipierte. Es ist sehr leicht zu lesen und gibt einen ausgezeichneten Überblick über die Phänomene der Interferenz von Wellen im allgemeinen und von Materiewellen im besonderen.

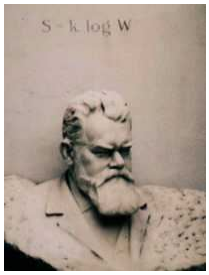
Ludwig Boltzmann (1844 - 1906) und die Atome

Advanced

- Ludwig Boltzmann war ein Wiener Physiker, der uns noch oft begegnen wird. Er hat letztlich die statistische Interpretation des **2.** Hauptsatzes der Thermodynamik, eines der grundlegendsten Gesetze der Physik (und der Informationstheorie) gefunden.
  - Die folgende Formel wird uns noch oft begegnen; sie steht auf seinem Grabstein:

$$S = k \ln W$$

  - ***S*** ist die **Entropie** , ein Zentralbegriff der Physik und Materialwissenschaft.
- Boltzmann hat als erster eine Theorie der Wärme formuliert, die auf der statistischen Betrachtung der Bewegung von Atomen beruht; der **statistischen Thermodynamik**.
  - Naturgemäß mußte er dazu Atome als real existierende kleinste Bausteine der Materie annehmen. Die Probleme, die er damit hatte, und die ihn in den Selbstmord trieben, schildert der nächste Absatz, der in loser Übersetzung aus dem Buch "Paradigms lost" von John L. **Casti** entnommen ist.



Boltzmanns Problem war, daß seine Theorie der Wärme ein Assemble von Atomen erforderte, das sich nach den Regeln der klassischen Mechanik bewegte. Er benutzte das Konzept eines Atoms als ein Materieteilchen, um in seiner Theorie "Wärme" als eine statistische Eigenschaft erklären zu können, die aus der Gesamtbewegung der Atome resultiert. Beachtenswert ist, daß diese Theorie um die Jahrhundertwende entstand, einige Jahre bevor die Arbeiten von Rutherford, Thomson und Bohr das moderne Konzept der Atome begründeten. Als Ergebnis seiner "atomaren Spekulationen" wurde Boltzmann in einen heißen Streit mit den damaligen Giganten der Wissenschaft verwickelt, insbesondere mit seinem Wiener Kollegen Ernst **Mach** und dem deutschen (physikalischen) Chemiker Wilhelm **Ostwald**, die kräftig gegen die Idee von Atomen argumentierten.Ostwald präferierte eine Theorie der Wärme die auf den Begriff der Energie beschränkt blieb und keine Materie brauchte.
Deprimiert durch die Angriffe seiner Gegner, aber auch durch seine nachlassende Sehfähigkeit und seinen - wie er das empfand - nachlassenden geistigen Fähigkeiten, nahm sich Boltzmann am **5.** September **1906** das Leben.

- Es wäre nun grundfalsch anzunehmen, daß Boltzmanns Gegner Dummköpfe waren, die das Offensichtliche nicht erkennen konnten. Sowohl Mach als auch Ostwald haben bleibende Beiträge zur Wissenschaft geleistet ("Machsche Zahl", "Ostwald-Reifung"). Auch heute noch berühmte Wissenschaftler wie Max **Planck**, Pierre **Duhem** oder Henri **Poincaré** gehörten zu den Gegnern der "Atome"! Was man aus dieser Episode lernen kann ist:
  - Auch in den Naturwissenschaften ist "**Wahrheit**" nicht immer sofort erkennbar; der individuelle Glaube an was "wahr" ist, hängt durchaus von Zeitströmungen und den vorherrschenden Paradigmen der Gesellschaft ab.
  - Daraus aber zu schließen, daß es *keine* naturwissenschaftlichen Wahrheiten gäbe, und *alle* Hypothesen und Theorien gleichberechtigt sind (was in letzter Konsequenz z.B. dazu führte, daß in vielen Staaten der USA die sog. "Creation", d.h. die Schöpfungsgeschichte der Bibel, gleichberechtigt neben der Evolutionstheorie gelehrt werden *muß* !) ist falsch! Denn *die Wahrheit* wird sich in den exakten Wissenschaften immer durchsetzen - es dauert nur gelegentlich ein Weilchen.

- Dazu nun die *Meinung eines Lesers*:
  - Hier die aus meiner Sicht notwendige Ergänzung: Die Schöpfungsgeschichte der Bibel will gar keine naturwissenschaftliche Theorie sein. Daraus aber zu schließen, dass sie keine Wahrheit enthielte, hieße, dem Szientismus zu huldigen, der außer der naturwissenschaftlichen Erkenntnis keine Wahrheit anerkennt. Die Evolutionstheorie mag in vielen Teilbereichen ihre Meriten haben. Auf die ganze Wirklichkeit angewandt hört sie aber auf, eine naturwissenschaftliche Theorie zu sein, sondern bleibt eine geschichtsphilosophische Hypothese, die philosophische Vorentscheidungen enthält, die wiederum stark in Richtung Szientismus weisen. Die Behauptung mancher Leute, sie könnten naturwissenschaftlich erklären, wie solche Phänomene wie Leben oder reflexives Bewußtsein entstanden seien, enthält ja bereits die Annahme, daß Leben oder reflexives Bewußtsein naturwissenschaftlich vollständig definierbar sind. Dies ist aber ein logischer Zirkel.
  - So, wie in ihrem Skript angedeutet, glaube ich auch, dass es naturwissenschaftliche Wahrheiten gibt. Aber ich glaube, dass es auch andere Wahrheiten gibt. Man darf die verschiedenen Ebenen nicht vermengen.

- Und dazu nun meine Aussage:

- Meine obigen Sätze sollten nicht ausschließen, daß die Bibel (und damit auch die Tora), der Koran, das Buch Mormon, oder jedes der vielen anderen heiligen Bücher auch Wahrheiten enthalten.
- Was ich aber schon bezweifle, ist der Anspruch auf alleinige, wörtliche und ausschließliche Wahrheit. Der Schwerpunkt in meinem letzten obigen Satz liegt auf deshalb auf "*alle*".
- In Übrigen gibt es in der Tat vieles um uns herum, das die Wissenschaft (noch?) nicht schlüssig (d.h. mit logischer Beweiskraft) erklären kann. Die nichtwissenschaftlichen Systeme (wie alle Religionen) können es aber auch nicht. Sie bieten nur Meinungen.

Periodensystem

Basics

- Diese Seite ist der Ausgangspunkt für detaillierte Darstellungen des Periodensystems. Da die normale Bildschirmgröße zu klein ist, um alle Informationen in der üblichen Darstellungsart des Periodensystems zu fassen, lassen sich durch Anklicken weitere Ebenen, geordnet nach den **Haupt-** und **Nebengruppen**, darstellen.
  - Die Hauptgruppen sind dabei die mit römischen Buchstaben und "**A**" gekennzeichneten Elemente in einer Spalte des Periodensystems; die Nebengruppen sind mit "**B**" markiert.
- Durch Anklicken der Gruppennummer oder eines Elementes lassen sich zahlreiche Daten für die betreffende Gruppe aufrufen

- Für *E-Techniker* etc. ist nur wichtig:
  - Die Edelgase haben die "optimale" Elektronenzahl. Die Elemente links daneben (**Halogene**) haben im Vergleich dazu ein Elektron zu wenig, die **Chalkogene** haben zwei Elektronen zu wenig. Elemente in Prinzip rechts daneben (aber aus Darstellungsgründen ganz links außen) haben ein Elektron zu viel (**Alkalimetalle**), zwei Elektronen zuviel (**Erdalkalimetalle**), usw.
  - **C**, **Si**, etc. in der **Hauptgruppe IV** haben **4** Elektronen zu wenig.
  - Beim Großteil der Elemente kann man lange philosophieren, ob sie jetzt zu wenig oder zu viel Elektronen haben. Rauskommen wird aber durch Philiosophieren eher nichts (siehe Aristoteles, der immer daneben lag). Wer's wirklich wissen will, lernt Chemie.

Alkali	Erd-alkali													Chalko-gene	Halo-gene	Edel-gase
IA	IIA	IIIB	IVB	VB	VIB	VIIB	VIIIB			IB	IIB	IIIA	IVA	VA	VIA	VIIA	VIII
H																	He
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	J	Xe
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
Fr	Ra	Ac															

Lanthanoiden und Actiniden

La	Ce	Pr	Nd	Rm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu
Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lw

Multiple Choice Test zu

2.1 Bindungspotentiale und erste Eigenschaften

Start Multiple Choice

Multiple Choice Test zu

2.2.1 Bindungstypen und Eigenschaften

Start Multiple Choice

Multiple Choice Test zu

2.3.1 Atome - Ausgangspunkt

Start Multiple Choice

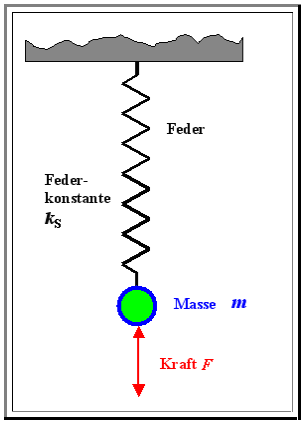
Alle Multiple Choice Tests zu Kapitel

2. Bindungen und einige Eigenschaften der Festkörper

Start Multiple Choice

Übung 2.1-1

Potential einer Feder und Folgerungen



- Gegeben sei eine *klassische* eindimensionale Feder (Dehnung nur in ***x***-Richtung), an der eine Kraft ***F*** wirken kann, und an die wir ggf. noch eine Masse ***m*** hängen können.
- **Fragenkomplex 1:**
  - Eine Kraft ***F*** bewirkt eine Auslenkung Δx (relativ zur Position des Federendes bei $F = 0$) in Richtung der Kraft. Wie ist dann sinnvollerweise die Federkonstante k_{Fed} definiert?
    Hinweis: Eine andere Feder mit der Federkonstanten $2k_{Fed}$ würde bei gleicher Kraft nur um $\Delta x/2$ ausgelenkt werden.
  - Wir denken uns jetzt noch die Masse ***m*** angehängt. Die Masse ***m*** ist jetzt durch die Feder an die Decke *gebunden* . Was ist das "Bindungs"potential für die Masse ***m***? Rechnung und Graph!
  - Ändert sich das Bindungspotential wenn die Decke jetzt in ***x***-Richtung auch verschiebbar ist, aber wir den Nullpunkt geschickt wählen?
  - Die klassische Feder ist vollkommen *elastisch* . Was bedeutet das wohl?
    Hinweis: Vergleiche den Abstand Masse ***m*** - Decke im kräftefreien Zustand *vor* und *nach* zwischenzeitlichem Anlegen einer *beliebigen* Kraft ***F***.
  - Zeichne die Kraft ***F*** - Auslenkung Δx Kurve *direkt* aus der Potentialkurve. Wie macht man das?

- **Fragenkomplex 2:**
- Wenn wir die Masse ***m*** jetzt um ein (beliebiges) Δx auslenken, und dann loslassen, wird die Masse auf ewige Zeiten eine Schwingung ausführen (weil wir noch keine Dämpfung eingebaut haben).
  - Mit welcher Frequenz findet diese Schwingung statt?
    Hinweis : Wir machen hier MaWi; keinePhysik. Man darf das berechen, *muss* aber nicht. Nachschauen im Physikbuch ist erlaubt.
  - Welche Energie steckt in der Schwingung?
    Wie kann man sich das **Energieniveau** einer Schwingung mit der Auslenkung $2\Delta x$ in der Potentialkurve sehr anschaulich darstellen?
  - Die Masse pendelt jetzt zwischen zwei Positionen. Wo ist sie *im Mittel* ?
    Wie kann man die Kurve der mittleren Position im Potentialbild einzeichnen?

- **Fragenkomplex 3:**
- Eine ideale Feder gibt es in der Wirklichkeit nicht. Ziehen wir sie zu lang, oder stauchen wir sie zu sehr, werden wir Probleme bekommen.
  - Skizziere die Potential- und Kraftkurve für eine *reale* Feder, die bei großen und kleinen Auslenkungen sehr viel steifer wird, d.h. ihre Länge trotz weiter zunehmender Kraft kaum mehr ändert. Mache die Übergänge im Potentialbild "weich".
  - Skizziere, nur mal so zum Spaß, die Potentialkurve einer Feder, die beim Zusammendrücken hart und immer härter wird, während sie beim Auseinanderziehen immer *weicher* wird bis $k_S \Rightarrow 0$.
  - Wie ist das in beiden Fällen jetzt mit der im Oszillator steckenden Energie?
    Kann man das immer noch im Potentialbild leicht sehen?
  - Zeichne ein, wo sich die Masse sich *jetzt* je nach Amplitude im Mittel befinden wird, falls sie hin-und-her schwingt ("oszilliert").

- **Fragenkomplex 4:**

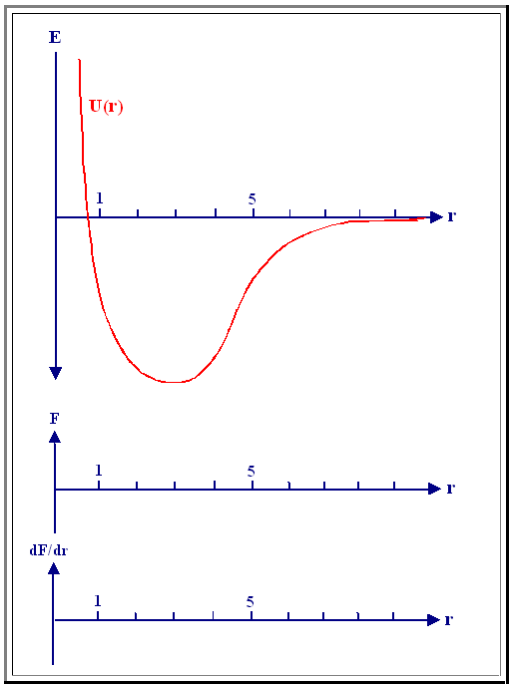
- Wir machen jetzt das System einfach kleiner - so klein wie es irgendwie geht.
  - Die Masse ***m*** ist dann ein Atom. Die "Feder" endet auch nicht mehr an der "Decke", sondern am Nachbaratom. Ändert sich was gegenüber den oben untersuchten Fällen?

Lösung

Übung 2.1-2

Potentialtopf und Kräfte

Gegeben sei ein Potentialtopf der etwa so aussieht (die Zahlen für ***r*** sind willkürlich):



Übertragen Sie die Zeichnung auf Papier (Mehr Platz lassen für ***F*** und **d*F*/d*r***) und beantworten Sie (ggf. durch Einzeichnen) folgende Fragen:

- Wo liegt r_0?
- Wie groß ist die Bindungsenergie? (einzeichnen)
- Wie sieht die Kraftkurve aus? (in das **2.** Diagramm unterhalb einzeichnen)
- Wie müßte die Kraftkurve verlaufen, damit das Molekül eine harmonische Schwingung wie ein Massepunkt an einer Feder durchführt?
- Wie sieht die **2.** Ableitung des Potentials aus? Was bedeutet der Nulldurchgang für die Aufgabe, das Molekül zu trennen?

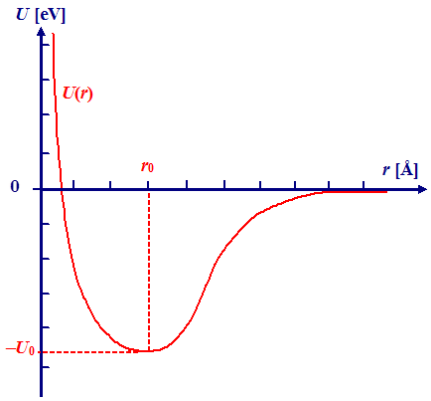
Lösung

Übung 2.1-3

Schwingungsfrequenz der Bindung

- Gegeben sei ein Bindungspotential der Form

$$U = -\frac{A}{r^n} + \frac{B}{r^m}$$



- Damit wir damit einfach rechnen können, ersetzen wir das komplette Potential durch eine Taylor Entwicklung bis zum quadratrischen Term um das Minimum (bei $r := 0$):

$$U = U_0 + 1/2 U_0'' \cdot x^2$$

mit

$$U''(r_0) = U_0 \cdot (nm/r_0^2)$$

- **Frage 1:** Zeige dass das obige Ergebnis für die zweite Ableitung von U korrekt ist.

- Die generelle Bewegungsgleichung mit der Lösung für die Resonanz- oder Eigenfrequenz einer harmonischen Schwingung lautet

$$m_a \cdot \frac{d^2x}{dt^2} + k_{Fed} \cdot x = 0$$

  - mit m_a = Masse des oszillierenden Atoms und k_{Fed} = "Federkonstante"
  - Für die Eigen(kreis)frequenz ω der Schwingung gilt

$$\omega = \left(\frac{k_{Fed}}{m_a} \right)^{1/2}$$

$$\omega = \frac{1}{r_0} \left(\frac{U_0 \cdot n \cdot m}{m_a} \right)^{1/2}$$

Frage 2: Leite die erste Gleichung für ω her und zeige dann, dass in der Tat für die Federkonstante $k_{Fed} = r_0^{-2} \cdot U_0 \cdot n \cdot m$ gilt.

Wenn wir uns jetzt noch an die bereits abgeleitete Beziehung für den Elastizitätsmodul erinnern, können wir ω auch wie folgt ausdrücken:

$$\omega = \left(\frac{E \cdot r_0}{m_a} \right)^{1/2}$$

Frage 3: Zeige, dass obige Gleichung stimmt.

Frage 4: Bestimme damit die Größenordnung für ω für einige einfache Materialien.

Hinweis: Werte für den ***E***-Modul findet man im Skript. Die Masse der Atome sollte auch leicht auffindbar sein

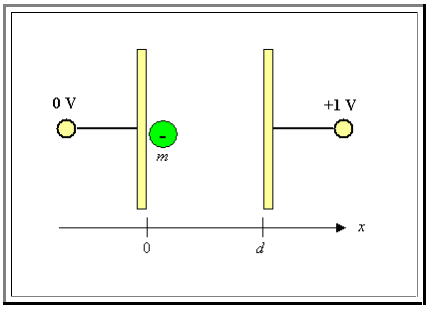
Frage 5: Was für Konsequenzen könnten sich daraus für die Wechselwirkung von "Wechselstrom" (in Form einer hochfrequenten elektromagnetische Welle) und dem Material ergeben?

Lösung

Übung 2.1-4

Das "Elektronenvolt"

Gegeben sei ein Plattenkondensator mit Platten im Anstand ***d***, in dem sich ein Teilchen der Masse ***m*** und der Ladung **-*e*** bei ***x* = 0 cm** befindet (z. B. ein Elektron) wie gezeichnet.



- Der Schwerpunkt des Teilchens sitzt natürlich bei ***x* = 0 cm**

Frage 1: Wie groß ist die Änderung der Energie des Teilchens nachdem es bis zur anderen Plattenseite, d. h. bis zu ***x* = *d* cm** gelaufen ist?

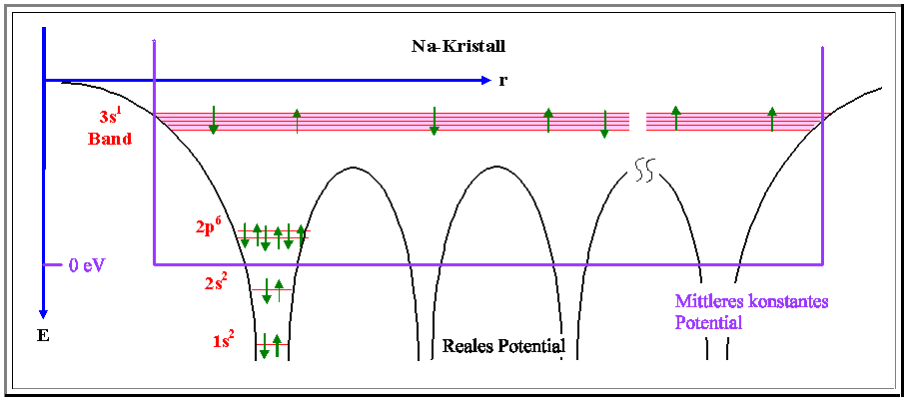
- Was ändert sich für Teilchen mit der selbem Ladung aber anderer Masse? Für Teilchen, die bei ***x* = 0 cm** nixht ruhig sitzen, sondern eine Geschwindigkeit $\mathbf{v_0}$ haben?

Lösung

Übung 2.3-1

Lösung der Schrödingergleichung für einen Kristall in der Approximation des "freien Elektronengases"

Das in die Schrödingergleichung einzusetzende Potential haben wir schon mal gezeichnet:



- Wir könnten das mal in einer ersten Näherung als eine Sinusfunktion ausdrücken (oder gleich als Fourierreihe), in die Schrödingergleichung einsetzen und mal sehen, wie weit wir mit dem jetzt *rein mathematischen* Problem kommen.
- Nicht weit. Also machen wir eine radikale Vereinfachung: Wir ersetzen das reale *periodische* Potential durch ein mittleres *konstantes* Potential $U = 0$ **eV**, d. h. wir legen auch den Energienullpunkt auf dieses Potenial. Außerdem schauen wir zunächst *nur* die x-Richtung an, d. h. wir behandeln das Problem erst mal eindimensional

Gegeben ist damit eine auch im **2.** Semester lösbare eindimensionale Schrödingergleichung mit dem Potential:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e}\cdot\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + U(x)\,\psi(x) = E\,\psi(x)$$

$$U(x) = \begin{cases} U_0 = \text{const.} = 0\ \text{eV} & \text{für } 0 \le x \le L_x \\ \infty & \text{sonst} \end{cases}$$

- Wir haben damit sozusagen einen eindimensionalen "Modellkristall" der Länge L_x postuliert.

Nun zur Aufgabe.

1. Zeige, dass die allgemeine eindimensionale Lösung (unter Benutzung der Normierungsbedingung) die folgende Form hat:

$$\psi(\underline{r}) = \left(\frac{1}{L_x}\right)^{1/2} \cdot \exp(i\,k_x\,x)$$

- Immer vorausgesetzt, daß gilt:

$$E = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_e}$$

2. Zeige, daß wir damit auch die *drei* dimensionale Lösung für einen Kristall der Ausdehnung $L_x = L_y = L_z = L$ haben (unter Benutzung der dreidimensionalen Normierungsbedingung), in der Form

$$\psi(\underline{r}) = \left(\frac{1}{L}\right)^{3/2} \cdot \exp(i\,\underline{k} \cdot \underline{r})$$

- Mit Wellenvektor $\underline{k} = (k_x, k_y, k_z)$ und Ortsvektor $\underline{r}$.

3. Zeige, daß die unten angeführten Gleichungen für den **Wellenvektor $\underline{k}$** sich aus den **periodischen Randbedingungen** $\psi(\underline{r} + L) = \psi(\underline{r})$ ergibt.

- (Wer Lust hat, darf auch gern alternativ für **feste Randbedingungen** der Form $\psi(0) = \psi(L) = 0$ ausprobieren.)

$$k_x = \pm \frac{n_x \cdot 2\pi}{L} \qquad k_y = \pm \frac{n_y \cdot 2\pi}{L} \qquad k_z = \pm \frac{n_z \cdot 2\pi}{L}$$

- Dabei sind die $n_{x,y,z}$ offenbar die *Quantenzahlen* mit denen die ∞ vielen Lösung durchnumeriert werden können; ihr Wertebereich ist **0, ±1, ±2, ...**

4. Jetzt zu den schwierigen Fragen:

- Was bedeutet diese Lösung für Elektronen im "Kristall" anschaulich?
- Wo befindet sich das Elektron eigentlich?
- Wo sind die Energeniveaus in diesem rechteckigen Potentialtopf? Die ersten **10** oder so kann man ausrechnen und einzeichnen. Wie groß ist dabei der Entartungsgrad, d. h. wieviel Elektronen haben auf einem Niveau Platz?
- Was passiert, falls wir mehr als ein Elektron betrachten?

Die Aufgabe mag schwierig erscheinen; das darin codierte "**freie Elektronengasmodell**" ist aber das grundlegende Paradigma der gesamten Halbleiterei! Es wird uns nicht erspart bleiben!

Lösung

Übung 2.3-2

Wellenlänge von Teilchen

1. Was für eineWellenlänge λ hat ein Teilchen der Masse ***m***, das mit der Geschwindigkeit **v** und damit dem Impuls ***p = mv*** seines Weges zieht. Die einfache Gleichung dazu heißt auch **de Broglie Beziehung**

- Hinweis: Der Impuls einer Welle wurde im Skript schon definiert.

2. Wie groß ist die Wellenlänge für Elektronen- bzw. Protonstrahlen mit Energien von **10 eV**, **10 keV** und **1 MeV**?

- Was könnte man erwarten wenn diese Wellen auf einen Kristall fallen? Hinweis: Was erwartet man für Lichtwellen mit $\lambda \approx$ **1 µm** wenn sie auf periodische Strukturen mit sehr viel größerer, kleinerer, oder ungefähr passender "Gitterkonstante" fallen?

Lösung

Übung 2.1-1

Schnelle Fragen zu:

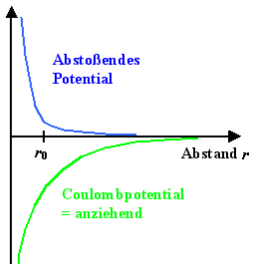
2.1 Bindungspotentiale und Eigenschaften

Hier sind einige schnelle Fragen zu 2.1.1: Das Bindungspotential

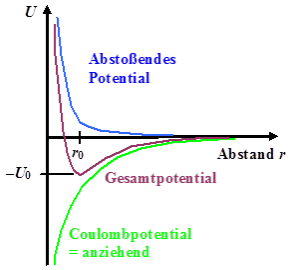
- Erkläre die Gleichung unten und berechne dazu insbesondere das Integral für einen beliebigen Abstand ***r'*** – und damit das *Potential* ***U(r)*** für die Coulombkraft.

$$W(r) = \int_{r_0}^{\infty} \frac{q_1 \cdot q_2}{4\pi \cdot \epsilon_0 \cdot r^2} \cdot dr = -\frac{e^2}{4\pi \cdot \epsilon_0 \cdot r_0}$$

- Vergleiche das Coulombpotential zunächst *qualitativ* (d. h. nur bezüglich der mathematischen Funktionalität) mit dem Potential der Gravititationskraft; dann *quantitativ*. Um wieviel größer ist die Coulombindungsenergie zwischen zwei typischen Ionen mit Masse m_{ion} im Abstand ***r*** im Vergleich zur Gravitationsbindungsenergie?
- Wieso ist das mit der Coulombkraft verknüpfte Potential "komplizierter" als die potentielle Energie ***mgh***, die man nach gemeinhin beim Herumturnen auf der Erdoberfläche hat?
- Wie ist das mit den Vorzeichen? Vergleiche für Gravitation und Coulombkraft.
- Warum *muss* das abstoßende Potential ungefähr so aussehen wie gezeichnet (Bild unten links)? Wie sieht die zugehörige Kraftkurve aus?



Coulombpotential und abstossendes Potential



Gesamtpotential (Summe Einzelpotentiale) und Bestimmungsgrößen

- Warum ist U_0 *nicht* die **Bindungsenergie** des **NaCl**-*Moleküls*, sondern die Bindungsenergie der *Ionen* Na^+ und Cl^-? Was muss noch dazu kommen, damit es die Bindungsenergie des **NaCl**-*Moleküls* wird?

Zeichne für dasModellpotential im Link folgende Größen so quantitativ als möglich ein:

- Die wirkende Kraft: Auf Vorzeichen aufpassen und Maxima / Minima sowie Wendepunkte, wo immer erforderlich, berücksichtigen. Man darf annehmen, dass die Potentialkurve ums Minimum herum ganz gut durch eine Parabel dargestellt werden kann.
- Nur mal so zeichnen wir noch die **2.** Ableitung der Potentialkurve ein. Was könnte der Nulldurchgang für eine Bedeutung haben?
  Hinweis: Man stelle sich vor, man versuche "per Hand" ein Molekül zu zerreißen, und betrachte die Kraft, die dazu nötig ist.

Was ist:

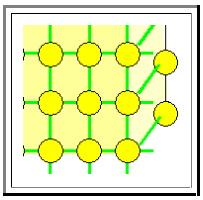
- Die *Madelungkonstante*? Wie kann man sie im Prinzip ausrechnen?
- Die *Ionisierungsenergie* ? Was kann man über Zahlenwerte qualitativ sagen (z. B. bei Betrachtung von Alkali-Metallen, Halogenen, Edelgasen, Edelmetallen, ...)
- Die *Elektronenaffinität*? Woduch unterscheidet sie sich *prinzipiell* von der Ionisierungsenergie?
  Hinweis: Übers Vorzeichen nachdenken.

Hier sind einige schnelle Fragen zu 2.1.2: Bindungspotentiale, Federn und Elastizitätsmodul

- Was für eine Potential muss eine ideale Feder (mit einer Feder*konstante*) haben, d. h. was für ein Funktionstyp liegt vor?
- Wie ist *Dehnung* definiert; was ist die Maßeinheit?
- Was unterscheidet mech. Spannung vom Druck? Wie vergleichen sich die Maßeinheiten?
- Was verbindet Federkonstante $\boldsymbol{k_{Fed}}$ und ***E***-Modul?
  Hinweis 1: Man betrachte keine gewickelte Feder (dann ist die Federkonstante auch von der Art der Wicklung abhängig), sondern ein gerades Stück (wie im Bild gezeigt). Zeige, dass gilt:
  $\boldsymbol{k_{Fed} = F/\Delta\, l = E \cdot (A/l) = E \cdot r_0}$ mit $r_0 \approx$ Bindungsabstand.
  Hinweis 2: Man darf Federn und Materialien so klein als möglich machen, aber nicht kleiner.
- Ist **σ = 1 GPa** im täglichen Leben eine große oder eher normale mech. Spannung? Überschlage z. B. die Spannung in einem Kranseil, das bei einem Querschnitt von **1 cm²** locker etliche Tonnen trägt.
- Skizziere in einem Spannungs-Dehnungs-Diagramm die Verformungskurve für folgende Fälle (benutze halbwegs realistische Dehnungen und einen Stern o.ä. für Bruch; benutze das Diagramm im Skript als Ausgangspunkt, es zeigt ein mittelhartes duktiles Material):
  - Ein sehr *hartes* (großer **E**-Modul) und *sprödes* Material.
  - Ein deutlich *weicheres* aber immer noch *sprödes* Material.
  - Ein typisches *Metall* (Hinweis: Metalle sind nicht spröde!)
  - Ein *Elastomer* , vulgo Gummi.

  Hinweis: Man kann die Frage mit etwas Vorstellungskraft und der alltäglichen Erfahrung beantworten, man muss das nicht "gelernt" haben.
- Wie kann man den ***E***-Modul bei (quantitativ) gegebenem Potentialtopf graphisch bestimmen?
- Was verbindet den Schmelzpunkt und das Bindungspotential?
- Warum ist der ***E***-Modul in etwa proportional zum Schmelzpunkt?

Hier sind einige schnelle Fragen zu 2.1.3: Bindungspotentiale und weitere Eigenschaften



- Was ist an dem typischen Bild eines Kristalls, wie nebenstehend gezeigt, im Grunde falsch?
- Was ist Temperatur ganz allgemein? Konkret für einen Kristall? Wie müsste man das in die Skizze einzeichnen (und warum tut man das i.a. nicht)?
- Hat ein Auto, das mit **v = 100 km/h** und bei **20 ° C** durch die Gegend fährt, eine größere *thermische Energie* als wenn es geparkt ist? Hat es eine größere *Gesamtenergie* als wenn es geparkt ist? Wo kommt ggf. der Unterschied her?
- Zeichne einen tpyischen Bindungspotentialtopf. Zeichne schematisch ein, wo das gebundene Atom sich bei **0 K** und bei zwei endlichen Temperaturen befindet (eine davon dicht am Schmelzpunkt). Wo ist es im Mittel? Was kann man zur mittleren Energie aussagen?
- Wie ist der thermische Ausdehnungskoeffizient definiert, und wie ergibt er sich (graphisch) aus dem Potential?
- Wie groß ist die Eigenfrequenz einer Masse ***m*** an einer Feder mit Federkonstanten $\boldsymbol{k_{Fed}}$?
- Mit welcher Frequenz (Größenordnung) vibrieren Atome im Kristall? Was bestimmt die (mittlere) Amplitude? Wo liegt diese Frequenz relativ zu bekannten Bändern im elektromagnetischen Spektrum?
- Wie ergibt sich (graphisch) die maximale Bruchspannung und -dehnung aus dem Potential? Welche Größenordung hat die max. Bruchdehnung in %? Was sagt das Experiment?

Hier sind einige schnelle Fragen zu 2.1.4: Vom Bindungspotential zum Kristall

- Was für eine Kristallsorte erwarten wir für ungerichtete Bindungen und gleichgroße Atome?
- Schwefel (**S**) hat zwei gerichtete Bindungsarme. Was kann als Festkörper allenfalls zustandekommen?
- Wie groß ist der Tetraederwinkel? (Rechnen!) Was zeichnet ihn aus? Welche räumliche Anordnungen bekommt man beim "Zusammenstecken" von Atomen?
- Welche Bedingungen müssen alle Ionenkristalle in kleinen Volumina erfüllen? Versuche, damit folgende Kristalle zu konstruieren:
  1. $\mathbf{Na^+Cl^-}$.
  2. $\mathbf{Ca^{2+}F^-_2}$

  Warum müssen sie strukturell unterschiedlich sein?

Übung 2.2-1

Schnelle Fragen zu

2.2 Bindungstypen und Eigenschaften

Hier sind einige schnelle Fragen zu 2.2.1: Die Ionenbindung

- Beschreibe kurz, wie man zur Energiebilanz der Ionenbindung kommt.
- Für was stehen die beiden Fragezeichen **?$_1$** und **?$_2$** in der nebenstehenden Gleichung?.
  - Sind die Vorzeichen in beiden Fälle immer positiv?
  - Was würe ein negatives Vorzeichen bedeuten?

$$Cl^- + ?_1\ (= +3{,}61\ eV) \Leftrightarrow Cl + e^-$$

Bilanz

$$Na + Cl + ?_2\ (= +1.43\ eV) \Leftrightarrow Na^+ + Cl^-$$

- Warum sind Ionenkristalle keine elektrischen Leiter? Warum ist das für (reine und perfekte) Ionenkristalle gleichbedeutend mit Durchsichtigkeit im optischen Bereich?
- Wie wird ein Photon *grundsätzlich* absorbiert (Achtung: das ist etwas anderes als gestreut, gebeugt, interferiert, ..).

Hier sind einige schnelle Fragen zu 2.2.2: Die kovalente Bindung

- Welche Atome tendieren zu kovalenten Bindungen?
- Was genau "bindet", warum ist die Bindung richtungsabhängig sobald andere als **s**-Orbitale beteiligt sind?
- Warum sind Elemente, die zusammen **8** Elektronen relativ zu einer Edelgasanordung zu wenig haben, ideale Bindungspartner?
  Hinweis: Gruppe **III** - **VI** im Periodensystem anschauen.
- Was zeichnet die Tetraeder-Bindungsarmkonfiguration und die Bindungswinkel aus?
- Warum sind kovalent gebundene Materialien Isolatoren oder bestenfalls Halbleiter?
- Gib einige Beispiele der für die **ET&IT** wichtigsten kovalent gebundenen Kristalle.

Hier sind einige schnelle Fragen zu 2.2.3: Die Metallbindung

- Welche Elemente tendieren zur Metallbindung? Was ist das gemeinsame Prinzip?
- Was hält die positiv geladenen Metallionen im Kristall trotz Coulombabstoßung zusammen?
- Ist die Metallbindung gerichtet oder ungerichtet? Was folgt daraus für die erwartete Kristallstruktur?
- Warum sind Metalle elektrische Leiter und undurchsichtig? Wieviele Elektronen pro Atom sind in der Lage Strom zu leiten? Was folgt daraus für die Dichte (**Zahl e^- /cm^3**). Berechne die Größenordnung dieser Dichte aus Massendichte **r** (z. B. **ρ(Cu) = 8.92 g/cm^3** und Atommasse (**63.55 u**; **u** = atomare Masseneinheit **1u = 1,660 540 2 · 10^{-27} kg**)
- Durch einen **Cu** Draht mit Querschnittsfläche **1 mm^2** fließt eine Stromdichte von **1 A/mm^2 = 1 C/smm^2** . Wie schnell müssen die in obiger Dichte vorhanden Elektronen fliessen, damit sie diesen Strom tragen können?

Ganz wichtige Aufgaben!

Hier sind einige schnelle Fragen zu 2.2.4: Bindungspotentiale und weitere Eigenschaften

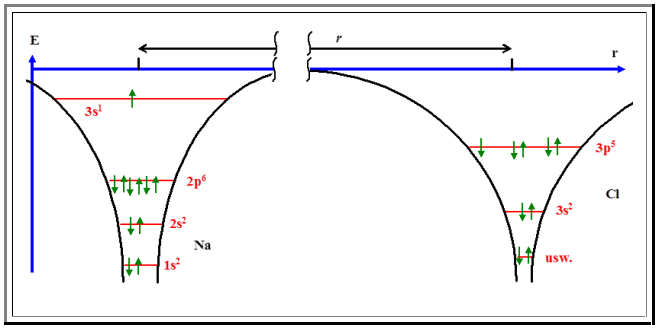
- Bei welchen Temperaturen "gehen sekundäre Bindungen auf"? Warum sind sie deshalb so ungeheuer wichtig?
- Wie kommen sekundäre Bindungen überhaupt zustande?
- Mit welcher Potenz ***n*** fällt die anziehenden Wechselwirkung bei Dipolinteraktionen ab (**$1/r^n$**).
- Welche Alltagsverbindung kristalliusiert durch sekundäre Bindungen?
- Nenne einige Materialien, bei denen sekundäre Bindungen essentiell sind.
- Nenne einige Materialien mit gemischten Bindungen (z. B. ionisch - kovalent).

Übung 2.3-1

Schnelle Fragen zu

2.3 Essenz der Quantentheorie

- **Hier sind einige schnelle Fragen zu 2.3.1:**
  - Nenne die wesentlichen Elementarteilchen und ihre fundamentalen Eigenschaften.
  - Aus was genau besteht die Welt der **EI&IT**?
- Zeichne einen Potentialtopf für Elektronen um ein Atom, einmal in einer *klassischen* Darstellung, und in der *quantenmechanischen* Situation daneben. Zeichne insbesondere schematisch **E**-Niveaus ein, und verteile darauf *mehrere* Elektronen.
  - Begründe, warum der *klassische* Potentialtopf sich im Prinzip nicht vom Potentilatopf des Systems Sonne - Planet unterscheidet, solange man keine Zahlen an die Achsen schreibt.
  - Beschreibe, was genau ein Elektron in einem Atompotentialtopfmodell "*tun* " kann, und was es es insbesondere *nicht* tun kann.
  - Zeichne die Ionisationsenergien ein.
  - Was ist das *Pauli Prinzip* und wie wirkt es sich in dem Potentialtopfmodell aus?
- Das Bild zeigt die Potentialtöpfe der Elektronen in weit voneienadenr entfernten **Na** und **Cl** Atomen.
  - Bringe die Atome auf den Bindungsabstand und zeichne das resultierende Potentialmodell. Beschreibe, wie die Bindung zustandekommt.



  - Widerhole den Vorgang, jetzt aber nur für **Na** Atome. Warum gibt es jetzt frei bewegliche Elektronen und ein Energie*band*?
  - Wieviel Elektronen hätten in dem Band Platz?

- **Hier sind einige schnelle Fragen zu 2.3.2:**
- Ein *klassisches* geladenes Teilchen und ein *quantenmechanisches* Elektron bewegen sich ein einem elektrischen Feld ***E*(*r*)**
  - Wie würd das Problem klassisch gelöst? ("Input", "Output", Verknüpfung)
  - Wie heißt die grundsätzlich Lösung der Schrödigergleichung eines quantenmechanischen Problems, und welche wesentlichen Eigenschaften hat sie?
  - Wie kommt man von einer *komplexen* Wellenfunktion ψ auf meßbare Eigenschaften?
  - Was ist ein quantenmechanischer *Zustand* ?
  - Was bedeutet *Energieentartung* ?
- Was genau beschreiben die folgenden Gleichungen?

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x,y,z)\cdot\psi^*(x,y,z)\cdot dxdydz = 1$$

$$\psi(\underline{r}) = \psi_0 \cdot \exp i(\underline{kr} - \omega t)$$

- Wie groß ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte **w(** $\underline{r}$**)** des durch die obige Wellenfunktion beschriebenen Teilchens?
- Was unterscheidet eine ebene Welle von einer Kugelwelle?

Hier sind einige schnelle Fragen zu 2.3.3:

Interpretiere die nachfolgenden Gleichungen und Zusammenhänge:

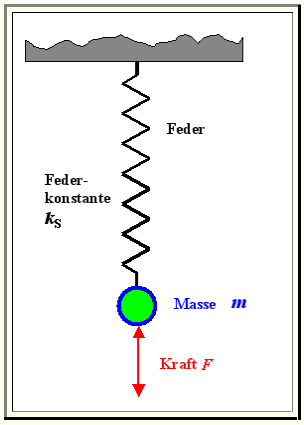
- $\lambda = 2\pi/k$.
- $p = \hbar \underline{k}$.
- $E_k = \hbar k^2/2m_e$.

- Schreibe die Grundformel einer laufenden ebenen Welle und einer stehenden (ebenen) Welle.
- Wie würde man ein Elektron in einem Elektronenstrahl durch Wellen beschreiben?
- Was passiert, wenn eine Welle auf eine periodische Struktur fällt?
- Was ist der *Tunneleffekt*? Wie würde das klassisch aussehen?
- Wodurch werden Wellen typischerweise *diskretisiert* , d. h. auf spezifische Wellenlängen (und damit Energien) beschränkt?

Lösungen zur Übung 2.1.2-1:

Potential einer Feder und Folgerungen

Illustration



Gegeben sei eine *klassische* eindimensionale Feder (Dehnung nur in x-Richtung), an der eine Kraft F wirken kann, und an die wir ggf. noch eine Masse m hängen können.

Fragenkomplex 1:

- Eine Kraft F bewirkt eine Auslenkung Δx (relativ zur Position des Federendes bei $F = 0$) in Richtung der Kraft. Wie ist dann sinnvollerweise die Federkonstante k_{Fed} definiert?
  Hinweis: Eine andere Feder mit der Federkonstanten $2k_{Fed}$ würde bei gleicher Kraft nur um $\Delta x/2$ ausgelenkt werden.
- Die Federkonstante ist definiert als $k_{Fed} = F/\Delta x$.
  Nimmt man als "Feder" einen Stab der Länge l_0, Querschnittsfläche A und Elastizitätsmodul E, erhält man (mit Spannung $\sigma = F/A$, Dehnung $\epsilon = \Delta l/l_0$, $E = \sigma/\epsilon$) $k_{Fed} = E \cdot A/l_0$.
- Wir denken uns jetzt noch die Masse m angehängt. Die Masse m ist jetzt durch die Feder an die Decke *gebunden* . Was ist das "Bindungs"potential für die Masse m? Rechnung und Graph!

Es gilt für das Potential ganz allgemein

$$U = \int_{l_0 = 0}^{l} F \cdot dl' = \tfrac{1}{2} k_{Fed} \cdot l^2$$

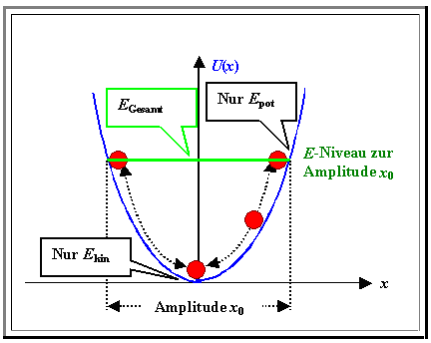
Der Graph ist damit eine schlichte Parabel (s.u.)

- Ändert sich das Bindungspotential wenn die Decke jetzt in x -Richtung auch verschiebbar ist, aber wir den Nullpunkt geschickt wählen?
- Nein, das Bindungspotential ändert sich nicht. Allenfalls das Minimum der Parabel ist nicht mehr bei Null, das ist aber bedeutungslos solange wir uns immer auf das Δl beziehen.
- Die klassische Feder ist vollkommen *elastisch* . Was bedeutet das wohl?
  Hinweis: Vergleiche den Abstand Masse m - Decke im kräftefreien Zustand *vor* und *nach* zwischenzeitlichem Anlegen einer *beliebigen* Kraft F.
- Elastisch heißt.
  1. Bei Wegnahme der Kraft zurück auf Ausgangszustand; *keine bleibende Verformung!*
  2. In der Regel haben wir auch lineares Kraft - Auslenkungsgesetz auch für *beliebig große* Auslenkungen.
- Zeichne die Kraft F - Auslenkung Δx Kurve *direkt* aus der Potentialkurve. Wie macht man das?
- Ableitung einer Parabel = Gerade.

Fragenkomplex 2:

Wenn wir die Masse ***m*** jetzt um ein (beliebiges) Δx auslenken, und dann loslassen, wird die Masse auf ewige Zeiten eine Schwingung ausführen (weil wir noch keine Dämpfung eingebaut haben).

- Mit welcher Frequenz findet diese Schwingung statt?
  Hinweis : Wir machen hier MaWi; keinePhysik. Man darf das berechen, *muss* aber nicht. Nachschauen im Physikbuch ist erlaubt.
- **1.** Nachschauen im Physikbuch gibt sofort: $\omega = 2\pi\nu = (k_{Fed}/m)^{1/2}$
- **2.** Lösen der relevanten Differentialgleichung $m d^2x/dt^2 + k_{Fed} \cdot x = 0$ mit Ansatz $x = \sin(\omega t)$ führt sofort auf $-\omega^2 m + k_{Fed} = 0$ und damit zur gesuchten Lösung.
- Welche Energie steckt in der Schwingung?
  Wie kann man sich das **Energieniveau** einer Schwingung mit der Auslenkung $2\Delta x$ in der Potentialkurve sehr anschaulich darstellen?
- Zu jeder Zeit ist die Summe aus potentieller Energie (= Potential) und kin., Energie = Gesamtenergie = const. Das läßt sich graphisch sehr anschaulich darstellen:

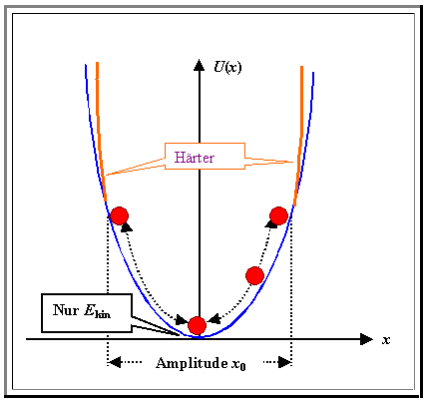


- Zu jeder Amplitude gíbt es ein in denPotentialtopf leicht einzeichenbares Energieniveau = Gesamtenenergie zu jeder Zeit und jeder Position. Da alle Amplituden erlaubt sind, gibt es ein *Kontinuum* an erlaubten ***E***- Niveaus
- Die Masse pendelt jetzt zwischen zwei Positionen. Wo ist sie *im Mittel* ?
  Wie kann man die Kurve der mittleren Position im Potentialbild einzeichnen?
- Man muss über alle horizontalen Linien mitteln, die eine linke und rechte Position verbinden. Da die Parabel symmetrisch ist, liegt der Mittelwert immer bei $x = 0$. Die Ortskurve der Mittelwerte ist damit identisch mit der ***U*** -Achse.

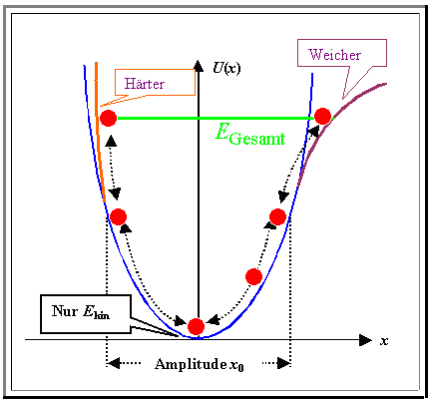
Fragenkomplex 3:

Eine ideale Feder gibt es in der Wirklichkeit nicht. Ziehen wir sie zu lang, oder stauchen wir sie zu sehr, werden wir Probleme bekommen.

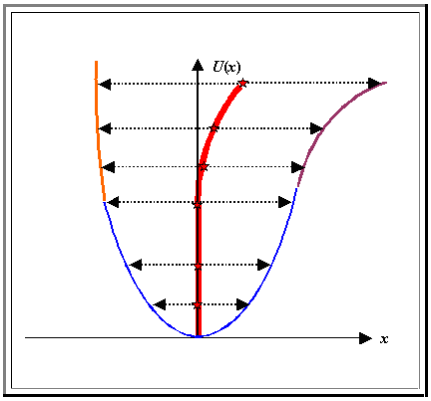
- Skizziere die Potential- und Kraftkurve für eine *reale* Feder, die bei großen und kleinen Auslenkungen sehr viel steifer wird, d.h. ihre Länge trotz weiter zunehmender Kraft kaum mehr ändert. Mache die Übergänge im Potentialbild "weich".
- Das ist einfach. Die Steigung des Potentials muss bei größeren Auslenkungen schneller wachen als be einer Parabel. Das sieht dann so aus wie unten gezeigt. Nach wie vor könnten wir Energieniveaus usw. einzeichnen.



- Skizziere, nur mal so zum Spaß, die Potentialkurve einer Feder, die beim Zusammendrücken hart und immer härter wird, während sie beim Auseinanderziehen immer *weicher* wird bis $k_S \Rightarrow 0$.
- Klarer Fall; sieht aus wie unten gezeichnet.



- Was sich allerdings ändert ist, dass ***x*(*t*)** oder **d*x*/d*t*(*t*)** keine schlichten **sin / cos** Funktionen der Zeit mehr sind. Da aber die Schwingung immer noch periodisch ist, können wir eine Fourierreihe ansetzen: $x(t) = x_0\sin(\omega_0 t) + x_2\sin(2\omega t) + \ldots$. Wir haben in unserer Schwingung jetzt "höhere Harmonische"; bei einem Musikinstrument spricht man von Obertönen.
- Wie ist das in beiden Fällen jetzt mit der im Oszillator steckenden Energie? Kann man das immer noch im Potentialbild leicht sehen?
- Schematisch läuft der Massenpunkt immer noch am Potential "hoch" bis zur Stelle größter pot. Energie = Stillstand. Diese Stelle hat links und rechts *per definitionem* (= Energieerhaltung) dieselbe Höhe; sie ist gleich der Gesamtenergie zu jedem Zeitpunkt. Damit können wir wieder das Gesamtenergiveau einzeichnen wie gezeigt.
- Zeichne ein, wo sich die Masse sich *jetzt* je nach Amplitude im Mittel befinden wird, falls sie hin-und-her schwingt ("oszilliert").
- Wie oben ausgeführt , konstruieren wir das erstmal graphisch. Rechnen ist nämlich gar nicht so einfach

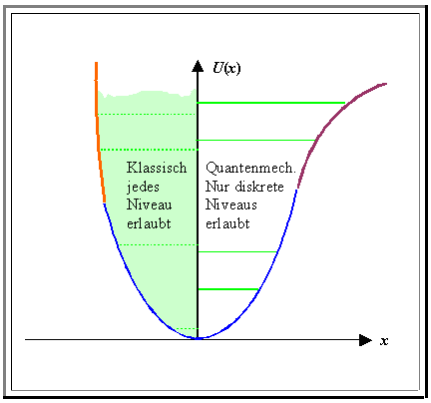


- Die rote Kurve gibt offenbar an, wo die Masse ***m*** sich je nach Amplitude im Mittel befindet.

Fragenkomplex 4:

Wir machen jetzt das System einfach kleiner - so klein wie es irgendwie geht.

- Die Masse ***m*** ist dann ein Atom. Die "Feder" endet auch nicht mehr an der "Decke", sondern am Nachbaratom. Ändert sich was gegenüber den oben untersuchten Fällen?
- Nein - zumindest nicht solange wir klassisch argumentieren und das Potential nutzen, das mit kleinen Abstände härter, und mit großen Abständen weicher wird. Falls die Quantenmechanik, wie der Name ja suggestiert, die Energie quantelt, können wir allenfalls erwarten dass die erlaubten Energieniveaus jetzt irgendwie gequantelt sind, z.B.so:

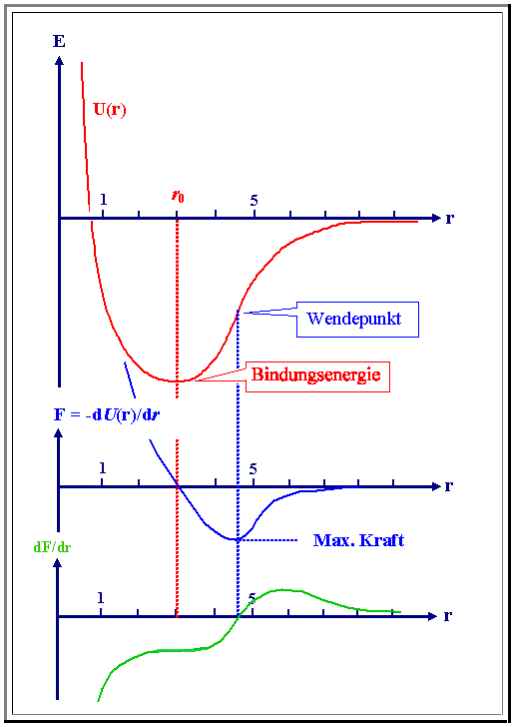


- Die Federkonstante bekommen wir aus dem ***E***-Modul - siehe oben: $k_{Fed} = E \cdot A/l_0$. dabei ist dann offenbar l_0 = Bindungslänge oder ungefähr Gitterkonstante bei Kristallen, und $A = (l_0)^2$

Lösungen zur Übung 2.1.2-2

Illustration

- Beantworten Sie für den gegebenen Potentialtopf folgende Fragen:
  - Wo liegt r_0?
  - Wie groß ist die Bindungsenergie? (einzeichnen)
  - Wie sieht die Kraftkurve aus? (in das **2.** Diagramm unterhalb einzeichnen)
  - Wie müßte die Kraftkurve verlaufen, damit das Molekül eine harmonische Schwingung wie ein Massepunkt an einer Feder durchführt?
  - Wie sieht die **2.** Ableitung des Potentials aus? Was bedeutet der Nulldurchgang für die Aufgabe, das Molekül zu trennen?
- Hier ist erstmal das ausgefüllte Diagramm



- Jetzt zu den Fragen:
- Wo liegt r_0?
  - Eingezeichnet; beim Minimum der Potentialkurve
- Wie groß ist die Bindungsenergie? (einzeichnen)
  - Eingezeichnet; entspricht Tiefe des Potentialtopfes.
- Wie sieht die Kraftkurve aus? (in das **2.** Diagramm unterhalb einzeichnen)
  - Eingezeichnet
- Wie müßte die Kraftkurve verlaufen, damit das Molekül eine harmonische Schwingung wie ein Massepunkt an einer Feder durchführt?
  - Die Kraftkurve müßte eine Gerade sein; dazu gehörte ein parabelförmiges Potential.
- Wie sieht die **2.** Ableitung des Potentials aus? Was bedeutet der Nulldurchgang für die Aufgabe, das Molekül zu trennen?
  - Eingezeichnet. Der Nulldurchgang erfolgt beim Abstand maximalen Kraftaufwands um das Molekül zu trennen. Bei größerem Abstand kann man dann mit kleinerer Kraft das Molekül komplett zerlegen.

Lösungen zur Übung 2.1.3

Illustration

- Man muss ganz schön rechnen, um die in der Aufgabe gezeigten einfachen Formeln zu verifizieren.
  - Wie es geht ist in den folgenden Links gezeigt:
    - Zum ersten Teil der Aufgabe (**Fragen 1 - 3**).
    - Zum zweiten Teil der Aufgabe (**Frage 4**)
- **Frage 5** (Was für Konsequenzen könnten sich daraus für die Wechselwirkung von "Wechselstrom" (in Form einer hochfrequenten elektromagnetische Welle) und dem Material ergeben?) beantworten wir hier:
  - Atome sitzen offenbar schwingungsfähig auf ihren mittleren Positionen.Wenn man Kräfte auf sie einwirken läßt, die ungefähr mit der Eigenfrequenz (= Resonanzfrequenz) oszillieren, wird man heftige Schwingungen und damit so manche Effekte anregen.
  - Ein elektrisches Feld in einer elektromagnetischen Welle tut genau das. Wenn die Frequenz im Bereich **10^{13} Hz** ist ("Terahertz"), erwarten wir heftige Effekte in Materie. Für "etwas" höhere Frequenzen (= Optik; um **10^{15} Hz**) oder tiefere Frerquenzen (z. B. Mikrowellen; um **10^{10} Hz**) könnte evtl. auch noch einiges passieren; z. B. wenn die Massen kleiner sind und damit die Resonanzfrequenz höher (weil wir möglicherweise jetzt nicht mehr die Atome sondern die Elektronen betrachten) oder weil die Massen größer sind (ganze Moleküle oder synchronisiert schwingende Kristallbereiche).
  - Die Effekte die wir damit erzeugen, werden wir (teilweise) im Kapitel 6 "Dielektrika" näher kennenlernen.

Lösungen zur Übung 2.1-4

Illustration

- Gegeben sei ein Plattenkondensator mit Platten im Anstand ***d*** , in dem sich ein Teilchen der Masse ***m*** und der Ladung ***-e*** bei ***x* = 0 cm** befindet (z. B. ein Elektron) wie gezeichnet.
  - Wie groß ist die Änderung der Energie des Teilchens nachdem es bis zur anderen Plattenseite, d. h. bis zu ***x* = *d* cm** gelaufen ist?
  - Was ändert sich für Teilchen mit der selbem Ladung aber anderer Masse? Für Teilchen, die bei ***x* = 0 cm** nixht ruhig sitzen, sondern eine Geschwindigkeit $\mathbf{v_0}$ haben?

- Sehr, sehr einfach:
  - Die Kraft auf eine Ladung ***q*** ist grundsätzlich ***F* = *q* · *E***; ***E*** ist die Feldstärke. In der Aufgabe ist ***E* = *Uld***; ***U*** ist die Potentialdifferenz, also **= 1 V**.
  - Die Arbeit ***E***, die verrichtet wird um das Teilchen von ***x* = 0 cm** nach ***x* = *d* cm** zu bringen ist

$$E = \int_0^d F \cdot dx = \frac{qU}{d} \cdot \int_0^d dx = qU$$

- In Worten: nach Durchlaufen einer Potentialdifferenz von **1 V** hat ein Teilchen der Ladung ***q*** seine Energie um ***qU*** geändert. Wie groß die Masse ist, oder was es für eine Anfangsenergie hatte, ist völlig egal.
  - Vorzeichen sind auch klar: Für den gezeichneten Fall wird das Teilchen in Richtung positive Platte *beschleunigt*, es wird bei ***d*** um $\frac{1}{2} m v_x^2 = qU$ schneller sein als vorher.
  - Hatte es schon eine Geschwindigkeit, wird es je nach Vorzeichen auch mal gebremst.
  - In jedem Fall ist die Energie*änderung* für ein Teilchen mit der Elementarladung **e** genau ein *Elektronenvolt* oder **1 eV**
- Damit ist klar: $\mathbf{1\ eV = 1{,}6 \cdot 10^{-19}\ C \cdot 1\ V = 1{,}6 \cdot 10^{-19}\ J}$.
  - Denn wir wissen selbstverständlich, dass **1 C = 1 As**; **1 VAs = 1 Ws = 1 J**.
- Immer wenn wir Teilchen betrachten - Atome, Elektronen , Photonen, Phononen (was immer das ist) - nehmen wir ab sofort als artgemäße Energieeinheit das Elektronenvolt!

Lösung zur Übung 2.3-1

Lösung der Schrödingergleichung für einen Kristall in der Approximation des "freien Elektronengases"

1. Zeige, dass die allgemeine eindimensionale Lösung (unter Benutzung der Normierungsbedingung) die folgende Form hat:

Wir starten mit zweimaliger Differentiation der zu verifizierenden Lösung in einer Dimension. Wir erhalten

$$\psi(x) = \left(\frac{1}{L}\right)^{1/2} \cdot \exp(i \cdot k \cdot x)$$

$$\frac{d\psi}{dx} = \left(\frac{1}{L}\right)^{1/2} \cdot i \cdot k \cdot \exp(i \cdot k \cdot x)$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \left(\frac{1}{L}\right)^{1/2} \cdot (-1) \cdot k^2 \cdot \exp(i \cdot k \cdot x)$$

- Eingesetzt in die Schrödingergleichung und mit $(1/L)^{1/2} = L^*$ (um Schreibarbeit zu sparen), ergibt sich im Gebiet mit $U = 0$ eV

$$\frac{\hbar^2}{2m_e} \cdot L^* \cdot k^2 \cdot \exp(i \cdot k \cdot x) = E \cdot L^* \cdot \exp(i \cdot k \cdot x)$$

Unser Lösungsansatz ist also dann, und *nur* dann eine Lösung, falls folgende Bedingung erfüllt ist:

$$E = \frac{\hbar^2 \cdot k^2}{2m_e}$$

- Das ist die postulierte Gleichung für die Gesamtenergie; der erste Teil der Aufgabe ist damit erledigt.
- Die Normierungsbedingung schenken wir uns hier; sie kommt gleich noch dreidimensional.

2. Zeige, daß wir damit auch die *drei*dimensionale Lösung für einen Kristall der Ausdehnung $L_x = L_y = L_z = L$ haben (unter Benutzung der dreidimensionalen Normierungsbedingung), in der Form

- Die dreidimensionale Schrödingergleichung kann wegen des gegebenen Potentials durch einen Produktansatz der Form $\psi(\underline{r}) = \psi_1(x) \cdot \psi_2(y) \cdot \psi_3(z)$ gelöst werden.
- Was für die x-Richtung galt, gilt auch für die y- und z-Richtung, also für die Komponenten eines Ortsvektors $\underline{r} = (x, y, z)$ und eines Vektors $\underline{k} = (k_x, k_y, k_z)$, der notwendigerweise die Dimension **[1/cm]** hat und den wir **Wellenvektor** nennen.
- Wir haben also

$$\psi(\underline{r}) = L^{**} \cdot \exp(i \cdot \underline{k} \cdot \underline{r})$$

- Der Vorfaktor L^{**} muss jetzt aus der *drei*dimensionalen Normierungsbedingng bestimmt werden:

$$\int_0^L\int_0^L\int_0^L (L^{**})^2 \cdot \exp(i \cdot k \cdot x) \cdot \exp(-i \cdot k \cdot x) \cdot dx\,dy\,dz \;\; != \;\; 1 \;\; = (L^{**})^2 \cdot \int_0^L\int_0^L\int_0^L dx\,dy\,dz$$

- Das Integral ist natürlich schlicht **= L³**; wir erhalten

$$L^3 \cdot (L^{**})^2 = 1 \qquad L^{**} = \left(\frac{1}{L}\right)^{3/2} \qquad \text{q.e.d.}$$

- Wir sehen auch, wo die lästigen Potenzen **3/2** etc. herkommen, die fast jede Formel der Quantentheorie verunstalten:
  - Die **2** kommt von der immer erforderlichen Quadrierung der Vorfaktoren bei der Betragsquadratbildung der Wellenfunktion, und die **3** oder was immer von den Dimensionen des betrachteten Problems.
  - Lästig, unschön, zu Fehlern verführend - aber eigentlich trivial.

- **3.** Zeige, daß die unten angeführten Gleichungen für den **Wellenvektor *k*** sich aus der (periodischen) Randbedingung $\psi(\underline{r} + L) = \psi(\underline{r})$ ergibt.
- Für den dritten Teil müssen wir die Randbedingungen in die Lösung einsetzen, d.h.

$$L^* \cdot \exp(i \cdot k_x \cdot x) = L^* \cdot \exp[i \cdot k_x \cdot (x + L)]$$

$$= L^* \cdot \exp(i \cdot k_x \cdot x) \cdot \exp(i \cdot k_x \cdot L)$$

- Die Gleichungen für k_y und k_z sind natürlich entsprechend. Diese Gleichungen können nur befriedigt werden, falls gilt

$$L^* \cdot \exp(i \cdot k_{x,y,z} \cdot L) = 1$$

$$k_{x,y,z} = n_{x,y,z} \cdot \frac{2\pi}{L}$$

$$n_{x,y,z} = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \ldots$$

- Die *Quantenzahlen*, die unsere Lösungsmannigfaltigkeit sortieren, kommen also aus den Randbedingungen!

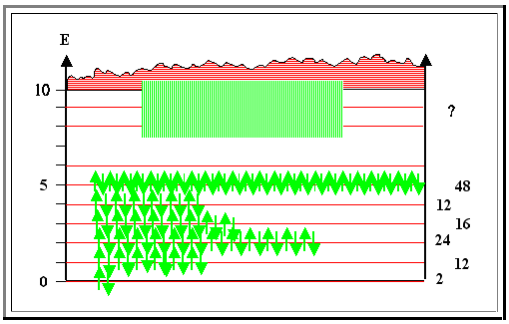
- **4.** Jetzt zu den schwierigen Fragen:
- Was bedeutet diese Lösung für Elektronen im "Kristall" anschaulich?
- Ein Ausdruck der Form $A = A_0 \cdot \exp i(\underline{kr})$ beschreibt grundsätzlich eine ebene Welle, die in ***k***-Richtung mit der Wellenlänge $\lambda = 2\pi/|\underline{k}|$. Damit die Welle "läuft", multipliziert man noch mit dem **Phasenfaktor exp(iω*t*)**. Unbedingt nachlesen!
  - Was "wellt" ist ψ, die dimensionslose Wellenfunktion. Was das bedeutet erschließt sich erst, wenn man aus der Wellenfuntion meßbare Parameter ableitet.
  - Die möglichen Richtungen im Kristall, in denen es "wellen" darf, sind durch die gequantelten Werte für ***k*** vorgegeben.
- Wo befindet sich das Elektron eigentlich?
  - Das ist einfach: Die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte ***W*** ist

$$W = \psi(\underline{r}) \cdot \psi^*(\underline{r}) = \left(\frac{1}{L}\right)^3 \cdot \exp(i \cdot \underline{k} \cdot \underline{r}) \cdot \exp -(i \cdot \underline{k} \cdot \underline{r}) = \left(\frac{1}{L}\right)^3$$

  - Die Wahrscheinlickeit, das Elektron irgendwo im Kristall zu finden ist überall gleich groß! Es "gehört" damit dem ganzen Kristall und hat sich "gleichmäßig verteilt".
- Wo sind die Energieniveaus in diesem rechteckigen Potentialtopf? Die ersten **10** oder so kann man ja leicht ausrechnen und einzeichnen.
  - Das macht jetzt Arbeit. Am besten wir machen eine Tabelle und schauen mal, was wir für größer werdende Quantenzahlen $n_{x,y,z}$ so bekommen:

Quantenzustand			Energie (× Konstante)	Zustände		Zahl der e⁻ pro E
n_x	n_y	n_z				
0	0	0	0		1	2
±1 0 0	0 ±1 0	0 0 ±1	1	2 2 2	6	12
±1 ±1 0	±1 0 ±1	0 ±1 ±1	2	4 4 4	12	24
±1	±1	±1	3		8	16
±2 0 0	0 ±2 0	0 0 ±2	4	2 2 2	6	12
Weiter ohne Details						
2	1	0	5			48
2	1	1	6			?
2	2	0	8			?
2	2	1	9			?
3	0	0				
und ~~so~~ *wie* weiter?						

- Damit können wir die Energieniveaus und die Maximalzahl an Elektronen pro Niveau (= Entartungsgrad) für kleine Quantenzahlen mal einzeichnen:



- Schon merkwürdig. Ein einfach erkennbares Bildungsgesetz gibt es nicht - es fehlt z. B. das Energieniveau bei "**7**"; vom Entartungsgrad mal ganz zu schweigen. *Daran werden wir noch arbeiten müssen!*

Was passiert, falls wir mehr als ein Elektron betrachten?

- Immer dieselbe Leier. Wir betrachten immer nur das "letzte", alle anderen schlagen wir gemittelt dem Grundpotential zu. Damit bleibt die Struktur der Lösung erhalten, während Zahlenwerte sich vielleicht ändern.
- Wir haben weiterhin diskrete Niveaus mit irgendeinem Entartungsgrad, und diese Niveaus füllen wir "von unten her kommend" mit Elektronen auf, bis das letzte untergebracht ist.

Falls es jemand nicht gemerkt haben sollte: Wir haben hier erstmalig in primitiver Form die bereits postulierten **Energiebänder** für die bindenden Elektronen im Kristall ausgerechnet!

Lösung zur Übung 2.3-2

1. Was für eineWellenlänge λ hat ein Teilchen der Masse ***m***, das mit der Geschwindigkeit **v** und damit dem Impuls ***p* = *mv*** seines Weges zieht. Die einfache Gleichung dazu heißt auch **de Broglie Beziehung**

Der Impuls ***p*** einer Welle war **p = ħ*k* = (h/2π) · 2π/λ = h/λ := *m*v** .

- Damit gilt für die Wellenlänge

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

- Das ist die mit Recht berühmte de Broglie Beziehung.

2. Wie groß ist die Wellenlänge für Elektronen- bzw. Protonstrahlen mit Energien von **10 eV**, **10 keV** und **1 MeV**? Was könnte man erwarten wenn diese Wellen auf einen Kristall fallen? Hinweis: Was erwartet man für Lichtwellen mit λ ≈ **1 µm** wenn sie auf periodische Strukturen mit sehr viel größerer, kleinerer, oder ungefähr passender "Gitterkonstante" fallen?

Da wir hier über rein kinetische Energie E_{kin} reden, gilt E_{kin} ½ $mv^2 = p^2/2m = eU$. ***U*** ist dabei dieBeschleunigungsspannung, ***eU*** die gewonnene kinetische Energie nach durchlaufen der Spannung ***U***.

- Daraus, und mit der obigen *de Broglie Beziehung* folgt sofort

$$\lambda = \frac{h}{(2m \cdot e \cdot U_e)^{1/2}}$$

- Ein paar repräsentative Zahlenwerte für Elektronenstrahlen sind:

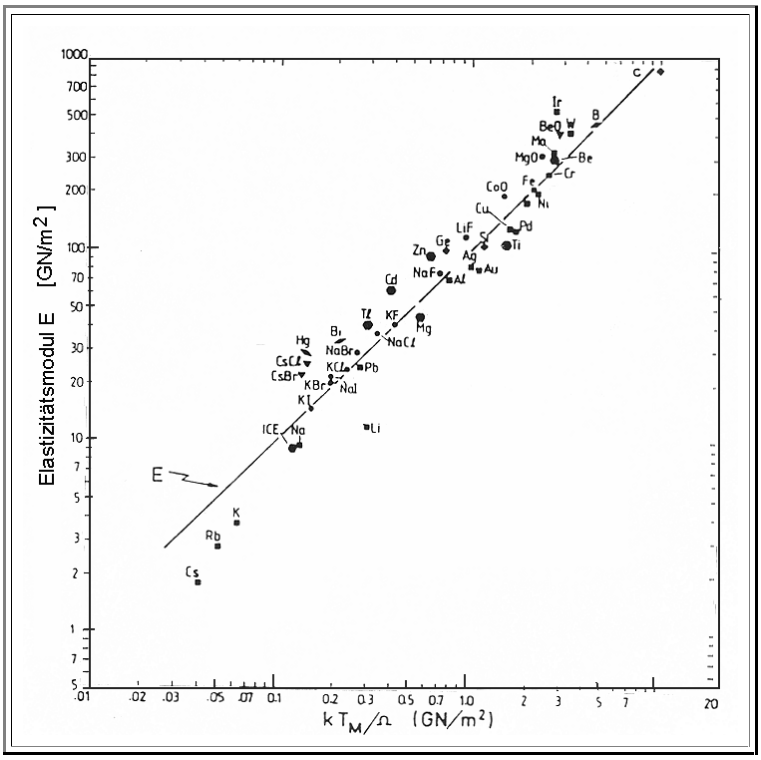
U_e [V]	λ_e [nm]
10	0.388
1 000	0.0388
10 000	0.0123

- Die Wellenlängen bei Protonenstrahlen sind nach der Formel um $(m_p/m_e)^{1/2} \approx 43$ mal kleiner
- Was wird wohl passieren, wenn die Welle auf periodische Strukturen mit Gitterkonstante ungefähr Wellenlänge fallen: Kräftige Interferenz und Beugung!

Illustration

Faustformel für den E-Modul

- Wie gut ist die im Hauptteil abgeleitete Faustregel für den **E**-Modul?
  - Jemand, den ich leider nicht kenne, hat sich die Mühe gemacht das mal graphisch darzustellen.Hier ist das Bild (Ω ist hier das Atomvolumen r_0^3):



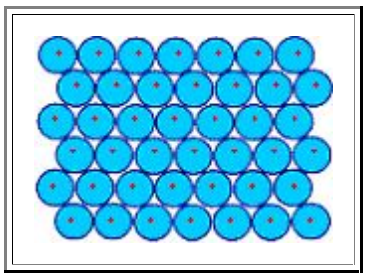
  - Also das paßt schon ganz gut. Für **kT_M/Ω = 1** sind wir in der Tat in der Nähe von "**80**":

Übung 3.1-1

Kristalle

Fragen

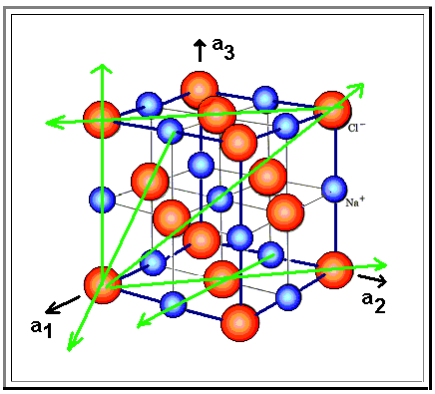
- **1.** Für eine dichteste Kugelpackung müssen die Kugeln = Atome auf einer Ebene so wie nebenstehend gezeigt angeordnet sein. Wie es dreidimensional weitergehen muss ist auch klar.Wie paßt das zu einem kubisch flächenzentrierten Gitter?
- **2.** Die Kombination von **2** identischen Atomen in der Basis (eines bei (**0**,**0**,**0**) das andere bei (½ ,½ ,½) mit einem hexagonalen Gitters ergibt ebenfalls eine dichteste Kugelpackung. Wie?
- **3.** Die Kombination von **2** Atome in der Basis (bei (**0**,**0**, **0**) und (¼, ¼, ¼)) mit dem kubisch flächenzentrierten oder ***fcc*** (**face centered cubic**) Gitter ergibt *keine* dichteste Kugelpackung dafür die Grundstruktur der meisten Halbleiter - **Si**, **Ge**, **GaAs**, **InP**. Erläutere.



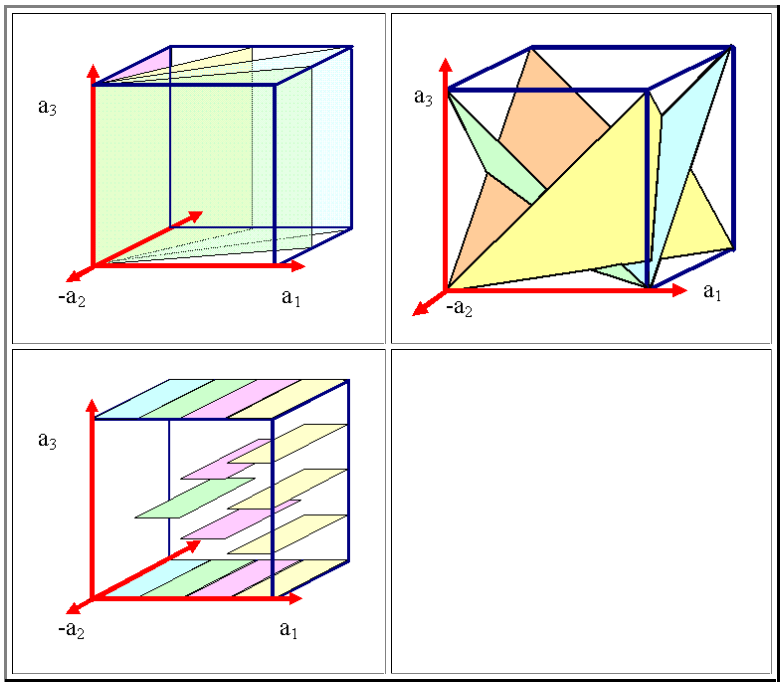
Lösung

Übung 3.1.1-2: Ebenen und Richtungen im Gitter

- Indiziere alle eingezeichneten Richtungen in dem *Gitter* des folgenden Kristalls.
  - *Kubisch flächenzentriertes* Gitter. Hier gezeichnet mit einer Basis; der resultierende Kristall könnte z.B. **NaCl** sein.



- Indiziere die markierten Ebenen im gegebenen Koordinatensystem des Gitters.



Lösung

Übung 3.2-1:

Die {111} Ebenen in der <110> Projektion

- Zeichne die Projektion eines **fcc** Gitters entlang einer <**110**>Richtung.
  - Zeichne in diese Projektion die beiden **{111}** Ebenen ein, die die Projektionsrichtung enthalten.
  - Betrachte die Stapelfolge auf diesen **{111}** Ebenen.

- Es ist sehr lehrreich, sich mit Gitterprojektionen zu beschäftigen; d.h. die dreidimensionale Anordung von Gitterpunkten (oder Atomen im Kristall) auf eine zweidimensionale Ebenen zu projezieren.
  - Besonders wichtig ist die in der Aufgaben gefragte Projektion eines **fcc** Gitters entlang einer **<110>** Richtung; das werden wir öfters mal brauchen.

Lösung

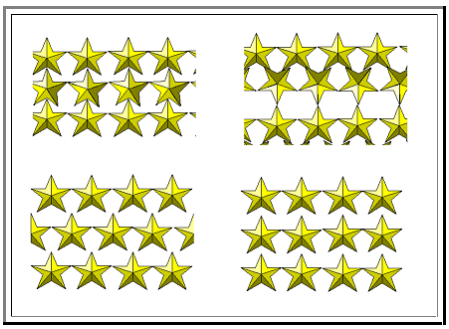
Übung 3.1-1

Schnelle Fragen zu

3.1.1 Kristall: Definition und Beispiele

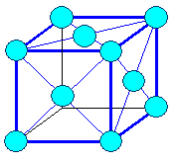
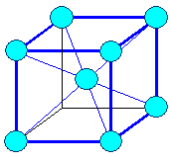
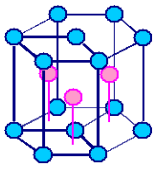
Hier sind einige schnelle Fragen zu 3.1.1: Kristall: Definition und Beispiele

- Skizziere Basis und Gitter für die folgenden (zweidimensionalen) Kristalle:



- Wie groß muss die Basis für einen Ionenkristall *mindestens* sein?
- Falls die Basisvektoren $\mathbf{a_1}$ und $\mathbf{a_2}$ beim hexagonalen Gitter die Länge **a** haben (= Gitterkonstante), wie lang ist dann $\mathbf{a_3 = c}$ falls das Gitter für eine dichteste Kugelpackung verwendet wird?
- Für die drei gezeigten Gittertypen kann man einfache geometrische Größen errechnen. Gezeigt ist der Fall für das **fcc** Gitter. Finde den Rest.

  - ***KZ*** = **Koordinationszahl** = Zahl der nächsten Nachbarn.
  - **Zahl** der Atome **pro Elementarzelle.**
  - **PD** = **Packungsdichte** = Volumen Atome/Volumen **EZ**

Gittertyp	 **fcc**	 **bcc**	 **hcp**
Basis-vektoren	$\mathbf{a_1 = a_2 = a_3 =}$ Gitterkonstante $= \frac{4r}{2^{1/2}}$ mit ***r*** **=** Atomradius	$\mathbf{a_1 = a_2 = a_3 =}$ Gitterkonstante **= ???** mit ***r*** **=** Atomradius	$\mathbf{a_1 = a_2 = a}$ **c/a = ???**
KZ	**12**	**???**	**???**
Atome pro EZ	**4** (**8** Eckpunkte zu **1/8**; **4** Flächenpunkte zu **1/2**, d.h. **8 · 1/8 + 6 · 1/2 = 4**	**???**	**???**
	Für **1** - atomige Basis		
PD	$\frac{4 \cdot 4/3\pi r^3}{3a^3} = 0{,}74$ (für **1** - atomige Basis)	**???** (für **1** - atomige Basis)	**???** (für **2** - atomige Basis wir gezeichnet)

Hier sind einige schnelle Fragen zu 3.1.2: Notation von Richtungen und Ebenen im Kristall

- Wie wird eine Richtung im Gitter indiziert?
- Wie wird eine Ebene im Gitter indiziert?
- Was besagen die folgenden Klammern mit den *Miller Indizes* ***a***, ***b***, ***c***: **(*a*, *b*, *cc*)**; ***a*, *b*, *cc*>**; **[*a*, *b*, *cc*]**; **{*a*, *b*, *cc*}**?
- Was ist eine "Eins, eins, eins" Ebene in einem kubischen Gitter?
- Was verbindet eine Richtung und eine Ebene mit denselben Miller Indizes?
- Wie groß ist in kubischen Gittern der Abstand der Ebenen {***h k l***}?

Hier sind einige schnelle Fragen zu 3.1.3: Kristall und Eigenschaften

Woher kennen wir folgende Eigenschaften eines Kristalls?

1. Elastizitätsmodul ***E***.
2. Thermischer Ausdehnungskoeffizienten α.
3. Frequenz der Gitterschwingungen.
4. Maximale Bruchdehnung und -spannung.

- Sind diese Eigenschaften isotrop oder anisotrop? Von was hängt das ggf. ab?
- Gebe Beispiele für halbwegs perfekte Einkristalle in Natur und Technik. was bestimmt bei natürlichen Einkristallen oft die wichtigen Eigenschaften?

Übung 3.2-1

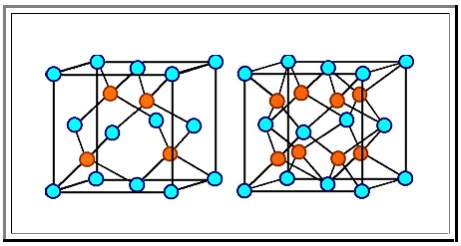
Schnelle Fragen zu

3.2 Dichteste Kugelpackungen und wichtige Kristalle

Hier sind einige schnelle Fragen zu 3.2: Dichteste Kugelpackungen und wichtige Kristalle

- Was ist eine dichteste Kugelpackung und was ist ungefähr die zugehörige Packungsdichte (in **%**)
- Für welche Bindungsart muss man bei Elementkristallen eine dichteste Kugelpackung erwarten?
- Wie würde man *experimentell* vorgehen, um eine dichteste Kugelpackung zu machen? Beschreibe erst die Packung in einer Ebene, und dann dieErweiterung auf **3** Dimensionen
- Warum erhält man auf diese Weise *zwei* komplett verschiedene Kristalle mit exakt derselben Packungsdichte?
- Welche Gitter mit welcher Basis gehören zu den zwei Varianten?

Das Bild zeigt zwei Kristalle auf mit **fcc** Gitters



- Bestimme die *Basis* für die beiden Fälle. Bestimme dazu zunächst, wieviele Atome die Elementarzellen jeweils enthalten. (Hinweis "Eckatome" zählen zu **1/8**, "Flächenatome" zu **1/2**, ...)
- Welche ist die Diamant Struktur. Gebe Beispiele für wichtige Kristalle dieser Struktur.
- Unterstelle, dass die beiden Kristalle Ionenkristalle darstellen. Gebe die jeweilige Nettoformel ($\mathbf{A^+_x - B^-_y}$). Warum muss für $_x \neq {}_y$ (z. B. für $\mathbf{CaF_2}$ ein relativ kompelxer Kristall resultieren?

Lösungen zur Übung 3.1-1:

Kristalle

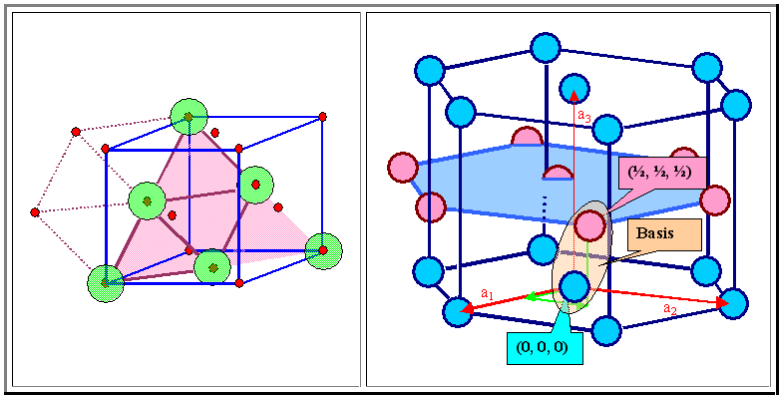
Illustration

Frage **1**: Für eine dichteste Kugelpackung müssen die Kugeln = Atome auf einer Ebene so wie nebenstehend gezeigt angeordnet sein. Wie es dreidimensional weitergehen muss ist auch klar.Wie paßt das zu einem kubisch flächenzentrierten Gitter?

- Die roten Punkte unten links markieren das **fcc** Gitter. Setzt man Atome erstmal nur auf die Gitterpunkte, die die eingezeichnete *Raumdiagonalebene* aufspannen, wird das charakteristische Sechseck der dichtesten Kugelpackung in einer Ebene sichtbar.
- Startet man die Raumdiagonalebene beim nächstgelegenen Atom (das in der Flächenmitte), sitzen die dann erfaßten Atom exakt in den Kuhlen der Nachbarebene; uns so weiter - wir haben damit dichteste Kugelpackung.

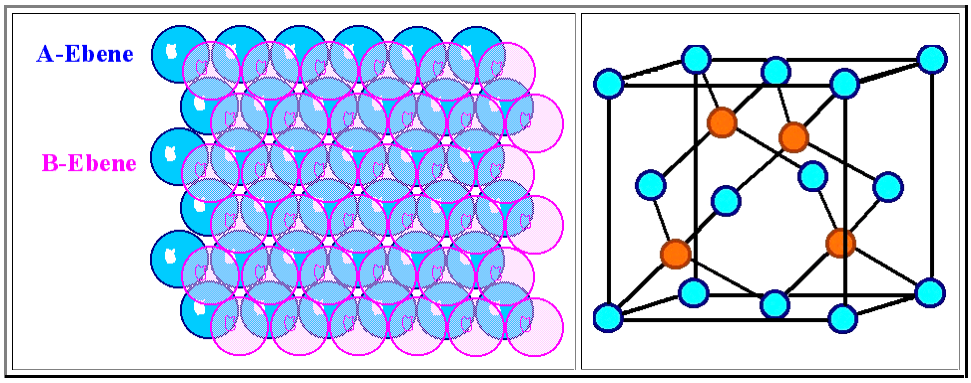
Frage **2.** Die Kombination von **2** identischen Atomen in der Basis (eines bei (**0**,**0**,**0**) das andere bei (½,½ ,½) mit einem hexagonalen Gitters ergibt ebenfalls eine dichteste Kugelpackung. Wie?

- Das Bild unten rechts zeigt das im Detail.



3. Die Kombination von **2** Atome in der Basis (bei (**0**,**0**, **0**) und (¼, ¼, ¼)) mit dem kubisch flächenzentrierten oder ***fcc*** (**face centered cubic**) Gitter ergibt *keine* dichteste Kugelpackung dafür die Grundstruktur der meisten Halbleiter - **Si**, **Ge**, **GaAs**, **InP**. Erläutere

- Wenn an die grünen Atome vom Bild oben links auf eine Eben zeichnet, fortsetzt, und dann noch die nächste Atomlage gleich draufsetzt, ergibt sich das Bild unten rechts:



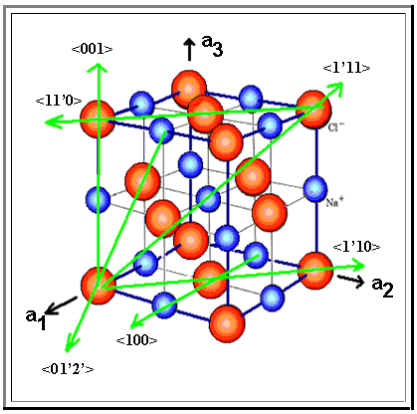
- Die zur Abwechslung jetzt blau gemalten Atome entsprächen den grünen Atomen vom ersten Bild, die pinken der nächsten Lage. Im Bild daneben wären dann nur blaue Atome präsent.
- Im **Si** Kristall (oder allgemeiner: in Kristallen mit Diamantstruktur) wie oben rechts gezeigt, sind aber für die sonst dichtest gepackten Ebenen noch die roten Atome dazwischen - das kann dann keine dichteste Kugelpackung mehr sein.

Lösungen zur Übung 3.1.1-2

Ebenen und Richtungen im Gitter

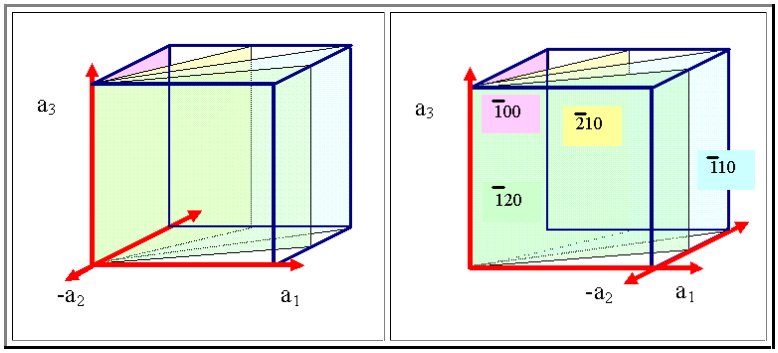
Illustration

- **Frage 1:** Indiziere alle eingezeichneten Richtungen in dem *Gitter* des gezeigten Kristalls.
- Hier ist die korrekte Indizierung:

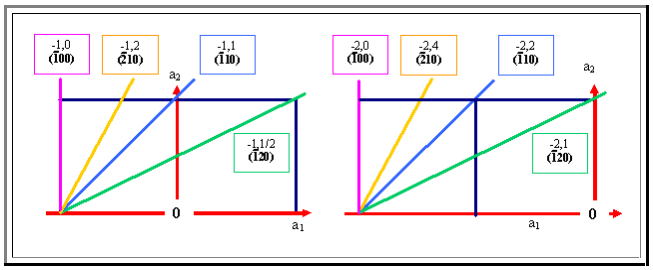


  - Nicht vergessen, dass man immer erst den Ursprung der Koordinatensystems, d.h. den Nullpunkt der Basisvektoren in den "Beginn" eines Richtungsvektors legen muß.
  - Oder eben die Richtung solange verschieben, bis sie durch den Ursprung läuft.

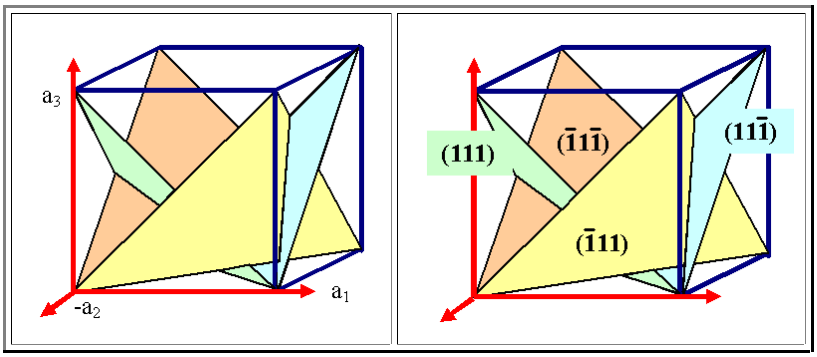
- **Frage 2:** Indiziere die markierten Ebenen im gegebenen Koordinatensystem des Gitters.
- Hier ist die korrekte Indizierung:



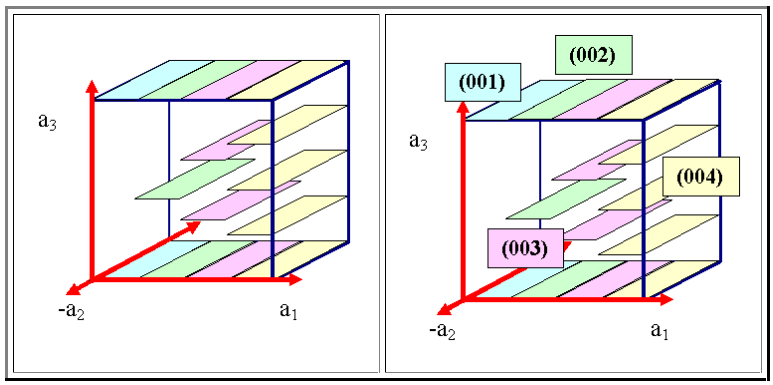
- Wie kommt man auf dieseLösung? Nun gut, einmal langsam zum Mitdenken:
  - Zuerst verschieben wir den Nullpunkt, so dass er nicht mehr auf der zu indizierenden Ebene liegt. das ist oben rechts schon angedeutet.
  - Um die Schnittpunkte genau zu bestimmen, betrachten wir jetzt einfach nur die Projektion auf die $\mathbf{a_1/a_2}$ Ebene (mit zwei verschiedenen Ursprüngen). Das reicht bei der ersten Aufgabe aus, da die Schnittpunkte aller Ebenen mit $\mathbf{a_3}$ alle bei ∞ liegen; der dritte Index ist also immer = **0**



  - Es ist jetzt klar, dass man immer dieselben Miller Indizes erhält.
- Hier die Lösung der nächsten Aufgabe:



Jetzt noch die Sache mit den Ebenenscharen. Sie zeigt, warum man nicht "kürzen" darf.

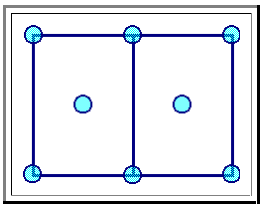


Lösungen zur Übung 3.2-1

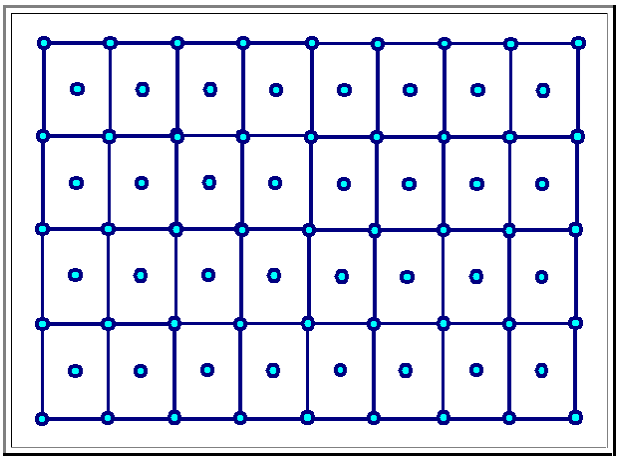
Die {111} Ebenen in der <110> Projektion

Illustration

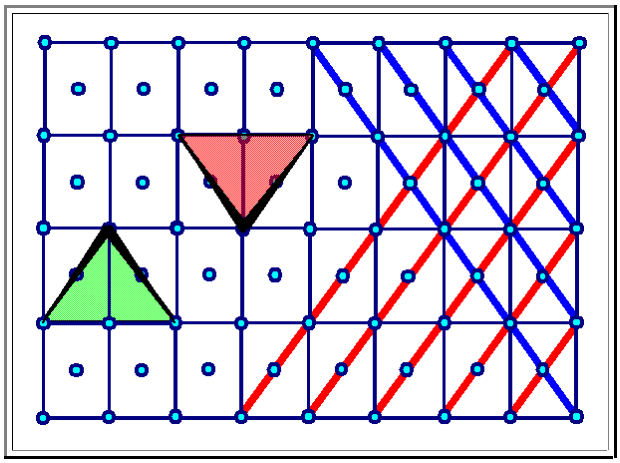
- Zeichne die Projektion eines **fcc** Gitters entlang einer <**110**>Richtung.
  - Zeichne in diese Projektion die beiden **{111}** Ebenen ein, die die Projektionsrichtung enthalten
  - Betrachte die Stapelfolge auf diesen **{111}** Ebenen.
- Es ist sehr lehrreich, sich mit Gitterprojektionen zu beschäftigen; d.h. die dreidimensionale Anordung von Gitterpunkten (oder Atomen im Kristall) auf eine zweidimensionale Ebenen zu projezieren.
  - Zunächst sollte man erkennen, daß dann zwei der vier **{111** } Ebenen zu "Strichen" mutieren.
  - Hier die Lösung Schritt für Schritt. Es ist hilfreich, dabei eineWürfel zu betrachten und in die richtigen Richtungen zu drehen.
- Die Projektion eines Würfels mit Seitenlänge ***a*** entlang einer **<110>** - Richtung, d.h. entlang einer *Flächendiagonalen* ergibt ein Rechteck mit Seitenlänge ***a*** und $a \cdot 2^{1/2}$.
  - Wenn man die Gitterpunkte des **fcc** Bravais Gitters mit kleinen Kreisen markiert, sieht das so aus:



  - Alle Gitterpunkte liegen exakt übereinander und erscheinen in der Projektion als ein Punkt.
- Erzeugt man mit dieser Elementarzelle ein *Gitter*, erhält man folgendes Bild:

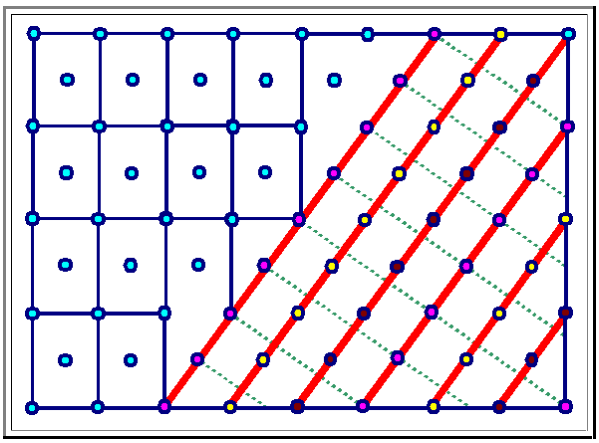


- Es gibt **4 {111}** Ebenenscharen. Zwei davon stehen senkrecht zur Zeichenbene, erscheinen also als (rote bzw. blaue) Strichesysteme
  - Zwei **{111}** Ebenenscharen liegen schräg; sie sind "perspektivisch" angedeutet. In der Zeichnung läuft die jeweilige Ebene vom dicken Teil der schwarzen Umrandungsstriche jeweils "nach unten".



Um die Stapelfolge auf der **{111}** Ebene zu erhalten, greifen wir uns eine Ebenenschar heraus und betrachten die Abfolge der Gitterpunkte senkrecht zu diesr **(111)** Ebene.

- Die grünpunktierten Linien sind Hilfslinien; sie stehen senkrecht auf der herausgegriffenen **(111)** Ebene.

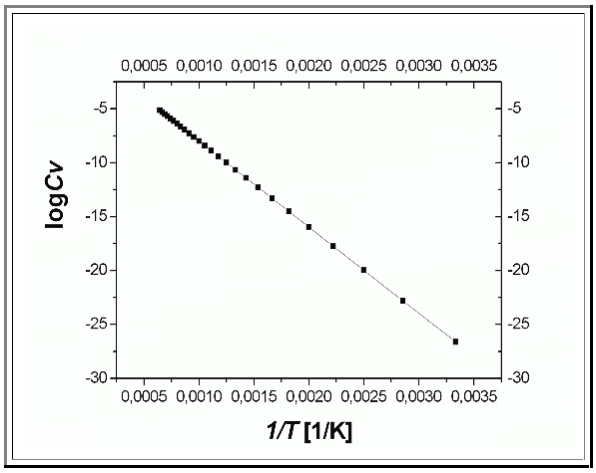


- Die Stapelfolge ist offensichtlich **ABCABCABC..**. . Die Verschiebung der jeweiligen Lagen in der **(111)** - Ebene ist **a/6 <112>** - wie es sein muß!
- Das **fcc** - Gitter ist damit, *wie behauptet*, ein *dichtest gepacktes Gitter* mit der Stapelfolge **ABCABC..** .

Übung 4.2-1

Gleichgewichtskonzentration von Leerstellen und Arrhenius Plot

- Wir betrachten eine **Cu**-Kristall und einen **Si**-Kristall. Die Bildungsenergie einer Leerstelle sei **1 eV** und **4 eV** (grob richtig).
- **Fragen**
  - **1.** Skizziere quantitativ die Konzentration $c_V = n/N_0$ der Leerstellen von ca. Raumtemperatur bis zum Schmelzpunkt (vom Link aus zu finden). Diskutiere kurz die Unterschiede von **Cu** und **Si**.
  - **2.** Ist eine direkte Darstellung von $c_V(T)$ wie oben gemacht sinnvoll? Warum ist eine Darstellung der Art **lg** c_V**(1/T)** viel sinnvoller? Stelle die Konzentration in diesem sogenannten **Arrhenius Plot** dar.
  - **3.** Bestimme aus dem nachfolgend gegebenen Arrhenius Plot die Bildungsenergie.

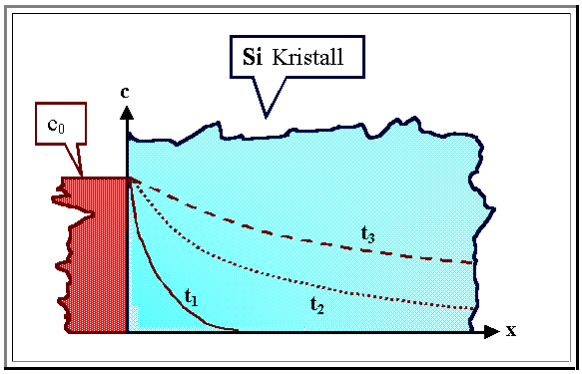


Lösung

Übung 4.2-2

Anwendung des 2. Fickschen Gesetzes

- Wir betrachten ein eindimensionales Problem: Ein Stück **Si** hat bei $x = 0$ auf der Oberfläche ein konstante und unerschöpfliche Dichte n_∞ an Arsenatomen; im Inneren liege die konstante Dichte $n_0 << n_\infty$ vor.
  - Damit haben wir eine Rand- und Anfangsbedingung gegeben.
- Die Arsenatome (oder Phosphor-, Boratome) diffundieren im Laufe der Zeit ins Silizium; wir können vermuten, dass sich Konzentrationsprofile wie gezeichnet einstellen werden.



  - Wer mag, liest erst mal nicht weiter, sondern schaut mal, wie weit sie bei der *Berechnung* der Diffusionprofile kommt - das Problem ist zusammen mit dem **2**. Fickschen Gesetz eindeutig gegeben und lösbar.

- Der Rest zeigt, dass der folgende Ausdruck die gesuchte Lösung ist:

$$n(x, t) = (n_\infty - n_0) \cdot \left(1 - \mathrm{erf}\left(\frac{x}{2(D \cdot t)^{1/2}}\right)\right) + n_0$$

  - Der Ausdruck "*erf* " steht dabei für "**Errorfunction** " oder **Gaußsche Fehlerfunktion**; eine tabellierte Funktion mit folgender Definition:

$$\mathrm{erf}\,(x) = \frac{2}{\pi^{1/2}} \cdot \int_0^x \exp - x'^2 \cdot dx'$$

- Daß bei der Lösung der **Diffusionsgleichungen**, wie die Fickschen Gesetze auch genannt werden, typische Funktionen der Statistik auftreten, ist eigentlich für uns nicht überraschend, denn wir haben schließlich rein statistische Bewegungen der Teilchen als Grundprozeß.
  - Dass die Differentialgleichungen der Fickschen Gesetze dann doch nicht so ganz einfach zu lösen sind - that's life!
- Hier noch ein paar nützliche Hinweise:

Hinweis I: $$\frac{d}{dz}\left[\int_a^{g(z)} f(y)dy\right] = f(g(z)) \cdot g'(z)$$

Hinweis II: $$\int_0^{+\infty} \exp(-y^2)dy = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$$

Hinweis III: $$erf(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z \exp\left(-y^2\right)dy$$

Lösung

Übung 4.2-1

Schnelle Fragen zu

4.2 Atomare Fehlstellen und Diffusion

Hier sind einige schnelle Fragen zu 4.2.1: Grundtypen und Konzentration

- Benenne die zwei Klassen und die je zwei typischen Vetreter der atomare Fehlstellen.
- Nenne einige Beispiele zu atomaren Fehlstellen im "täglichen Leben".
- Wie lautet die Formel für die Konzentration an Leerstellen oder Eigen-**ZGA** im thermodynamischen Gleichgewicht? Wie kann man diese Formel über Besetzung von Energieniveaus interpretieren?
- Wi egroß, ungefähr sind Bildungsenergien atomarer Fehlstellen?
- Wie groß ist die thermische Energie kT_R bei Raumtemperatur T_R?
- Was ist ein Boltzmannfaktor?
- Was bedeutet "Diffusion" von Leerstellen? Was genau passiert?

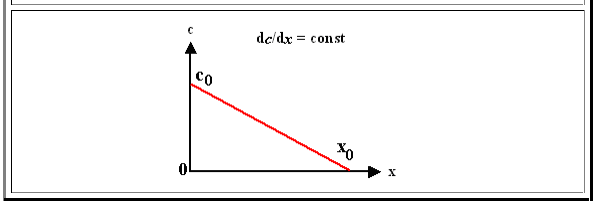
Hier sind weitere schnelle Fragen zu 4.2.2: Diffusion mit atomaren Fehlstellen und Ficksche Gesetze

- Wie kommt die substitutionelle atomare Fehlstelle **P** (oder **As**, **B**, ...) in den **Si** Kristall beim Machen einer integrierten Schaltung?
- Wie groß ist die "Hüpffrequenz" r eines Atoms in eine Leerstelle (Formel und ca. Zahlen für die beiden wichtigen Größen).
- Wie verteilen sich Teilchen im thermodynamischen Gleichgewicht auf die Energieniveaus E_1 und E_2?
- Was ist eine Teilchenstromdichte j? Welche treibende Kräfte - ganz allgemein - können Teilchenstromdichten erzeugen? Die Teilchen können auch geladen sein.
- Wie lautete das **1.** Ficksche Gesetz in Proportionalitäten? Wie heißt die Proportionalitätskonstante?
- Was besagt das **2**. Ficksche Gesetz? Warum ist es eine Art Bilanzgleichung?
- Was bestimmt den Diffusionskoeffizienten D eines Teilchens qualitativ (zu welchen Größe muss D proportional sein?)

Jetzt eine etwas involviertere Frage:

- Das 2. Ficksche Gesetz lautet:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \cdot \left(\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} \right) = D \cdot \Delta c$$



- Für das gezeigte Konzentrationsprofil mit $\partial^2 c / \partial x^2 = 0$ würden damit *keine* zeitlichen Änderungen der Konzentrationen eintreten, obwohl ein konstanter Diffusionstrom $j = -D \cdot const.$ fließt, der ständig Teilchen nach rechts transportiert?
- Kann es sowas geben? Finde Beispiele (das Profil muss dabei nicht durch Diffusion bestimmt sein)
- Wie ist dieser scheinbare Widerspruch zu erklären? Was für Randbedingungen müssen wohl vorliegen?

Hier sind weiter schnelle Fragen zu 4.2.3: Random Walk und Diffusionslänge

- Was ist ein "random walk"?

Ein diffundierendes Teilchen, das einen "random walk" durchführt, wird durch folgende (teilweise miteinander verknüpften) Größen charakterisiert: Schrittweite a (ca. Gitterkonstante) Gesamtzahl der Schritte = Schrittzahl = N. Sprungfrequenz = r, Diffusionskoeffizient = D, gesamte Laufzeit = τ, Diffusionslänge = L.

- Was ist die Diffusionslänge anschaulich?
- Gebe mindestens eine Beziehung zwischen der Diffusionslänge und den obigen Größen.

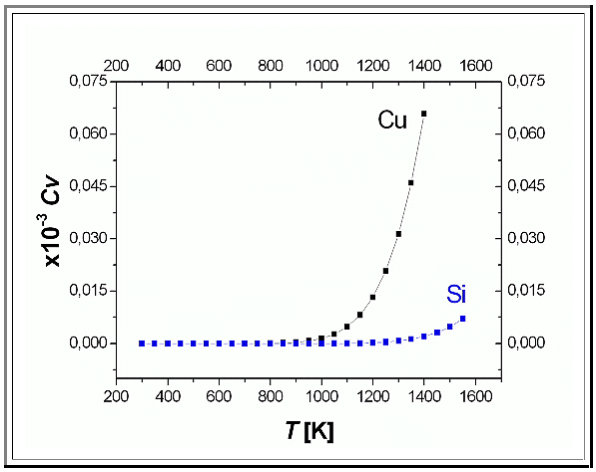
Lösungen zur Übung 4.2-1:

Arrhenius Plot

Illustration

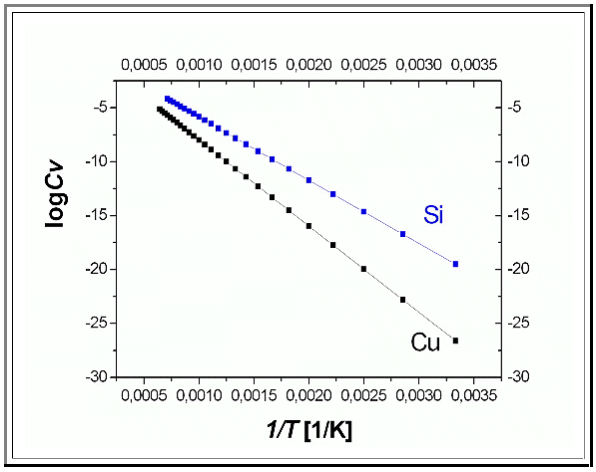
Frage **1**:

- Hier ist die Graphik:



Frage **2.**

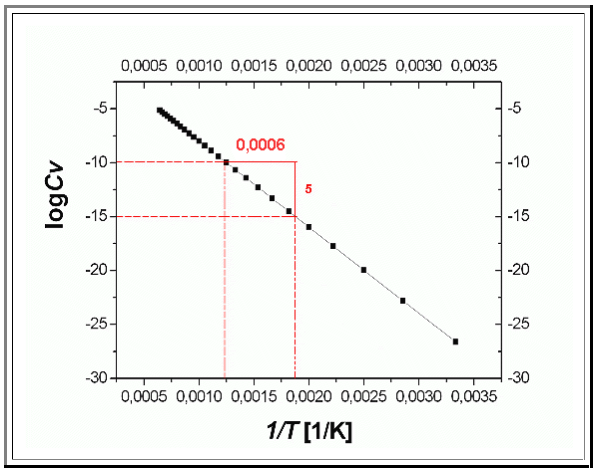
- Hier ist die Arrheniusdarstellung der obigen Graphik:



- Die Vorteile der Arrheniusdarstellung gegenüber der direkten Auftragung sind offenkundig.

Frage **3**:

- Hier nochmal die Graphik mit einem eingezeichneten Steigungsdreieck



- Die Steigung ist offenbar so um **–5/ 0,000625 = 8000 K^{-1}**

Aufgetragen haben wir **log*c* = log[exp–(*E*$_F$/k*T*)] = log(e) · ln[exp(–*E*$_F$/k*T*)] = –log(e) · (*E*$_F$/k*T*)**
oder ***y* = –(log(e) · *E*$_F$/k) · *x*** .

- Man muss hier höllisch aufpassen., ob mand **10**-er oder natürlichen Logarithmus genommen hat!
- Damit gilt Steigung = **8000 K^{-1} = log(e) · *E*$_F$/k** oder
  ***E*$_F$ = (1/log(e)) ·k · 8000 K^{-1} = 2,3 · 8000 K^{-1} · 8,6 · 10^{-5} eV·K^{-1} = 1,58 eV**
- Klar ist auch, dass es besser gewesen wäre, den Maßstab der ***x***-Achse genauer zu geben (z.B. als mehrstellige Zahl mit **10^{-3}** für die ganze Achse).

Lösungen zur Übung 4.2-2:

Anwendung des 2. Fickschen Gesetzes

Illustration

Zeige, dass der folgende Ausdruck die Lösung des Diffusionproblems: Eindiffusion von außen; "unendliche Quelle ist

$$n(x, t) = (n_{¥} - n_0) \cdot \left(1 - \mathrm{erf}\left(\frac{x}{2(D \cdot t)^{1/2}}\right)\right) + n_0$$

- Der Ausdruck "*erf* " steht dabei für "**Errorfunction**" oder **Gaußsche Fehlerfunktion** ; eine tabellierte Funktion mit folgender Definition:

$$\mathrm{erf}\,(x) = \frac{2}{\pi^{1/2}} \cdot \int_0^x \exp - x'^{\,2} \cdot dx'$$

Erstmal definieren wir das Problem etwas schärfer und allgemeiner:

- Wir betrachten $n(x, t)$, d. h. wir werden das 2. Ficksche Gesetz benötigen:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = D \cdot \left(\frac{\partial^2 n}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 n}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 n}{\partial z^2}\right) = D \cdot \Delta n$$

- In $n_{¥}$ und n_0 "verstecken" sich die Randbedingungen. Offenbar (nachdenken!) ist ihre Bedeutung wie folgt:
  - $n_0 = n(x, t = 0)$; d.h. es beschreibt die örtlich konstante **As**-Grundkonzentration im **Si** zu Beginn der Diffuison (muss ja nicht unbedingt **= 0** sein).
  - $n_{¥} = n(x = , t)$; d.h. es beschreibt die **As**-Konzentration auf der Oberfläche zu allen Zeiten. Da es konstant ist, haben wir eine unerschöpfliche Quelle.
- Damit ist alles klar, die Lösung erhalten wir wie folgt:

Lösungen

a) Diffusionsgleichung

zu zeigen sind zwei Bedingungen:
i) Die gegebene Gleichung $c(x,t)$ erfüllt die Diffusionsgleichung und
ii) die gegebenen Randbedingungen werden von $c(x,t)$ erfüllt.

zu i)

$$\text{Hinweis I:} \qquad \frac{d}{dz}\int_0^{g(z)} f(y)dy = f(g(z))\cdot\frac{dg}{dz}(z)$$

$$\text{mit} \qquad g(z) = \frac{x}{2\sqrt{Dt}} \quad \text{und} \quad f(y) = \exp(-y^2)$$

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -(c_\infty - c_0)\frac{2}{\sqrt{\pi}}\left(\exp(-\frac{x^2}{4Dt})\cdot\frac{x}{2\sqrt{D}}(-\frac{1}{2}t^{-\frac{3}{2}})\right)$$

$$\frac{\partial c}{\partial x} = -(c_\infty - c_0)\frac{2}{\sqrt{\pi}}\left(\exp(-\frac{x^2}{4Dt})\cdot\frac{1}{2\sqrt{Dt}}\right)$$

$$\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} = (c_\infty - c_0)\frac{2}{\sqrt{\pi}}\left(\exp(-\frac{x^2}{4Dt})\cdot\frac{1}{2\sqrt{Dt}}\frac{2x}{4Dt}\right)$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial c(x,t)}{\partial t} - D\frac{\partial^2 c(x,t)}{\partial x^2} &= -\frac{2}{\sqrt{\pi}}(c_\infty - c_0)\exp(-\frac{x^2}{4Dt})\cdot\left[-\frac{x}{4\sqrt{D}t^{\frac{3}{2}}} - D\frac{-2x}{8D^{\frac{3}{2}}t^{\frac{3}{2}}}\right] \\ &= 0 \qquad \text{q.e.d.}\end{aligned}$$

zu ii) Randbedingungen:

$$\text{I:} \qquad c_0 = c(x, t=0)$$

$$\begin{aligned}c(x,t=0) &= (c_\infty - c_0)\cdot\left(1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_0^\infty \exp(-y^2)dy\right) + c_o \qquad \text{- mit Hinweis II} \\ &= (c_\infty - c_0)\cdot\left(1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}}\frac{\sqrt{\pi}}{2}\right) + c_0 \\ &= c_0 \qquad \text{q.e.d.}\end{aligned}$$

$$\text{II:} \qquad c_\infty = c(x=0,t)$$

$$\begin{aligned}c(x=0,t) &= (c_\infty - c_0)\cdot\left(1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_0^0 \exp(-y^2)dy\right) + c_o \\ &= c_\infty \qquad \text{q.e.d.}\end{aligned}$$

Übung 5.1-1

Mittlere thermische Energien

- Berechne die mittlere thermische Energie der nachfolgenden Systeme und ziehe Schlussfolgerungen wie angegeben. Über diesen Link kann man die benötigten Daten finden.
- **1.** Luft bei **300 K**. Es genügt, Stickstoff und Sauerstoff im Verhältnis **80 : 20** zu betrachten; man darf dann auch eine mittlere Masse der Moleküle annehmen.
  - Betrachte zunächst nur eine Komponente der Geschwindigkeit, z. B. $\mathbf{v_x}$. Bestimme daraus den Mittelwert von **v**. Diskutiere den erhaltenen Wert im Lichte bekannter Geschwindigkeiten.
  - In welcher Größenordung muss die Belichtungszeit einer (fiktiven) hochauflösenden Kamera sein, damit ein scharfes Bild entsteht? *Hinweis:* Während der Belichtunsgzeit sollte sich das Teilchen nur um einen Bruchteil seiner Dimension bewegt haben.
  - Wie weit kommt ein Luftmolekül im Mittel, bevor es mit einem anderen Luftmolekül kollidiert? *Hinweis:* Mittlerer Abstand folgt aus Dichte und Molekülgewicht. Was folgt daraus für die mittlere Zeitdauer zwischen Kollisionen?
- **2.** Wasser bei **300 K**.
  - Gehe analog zur Luftaufgabe vor.
  - Berechne zusätzlich die ungefähre Rotationsgeschwindigkeit des Moleküls. *Hinweis:* Finde die Formel für die Energie eines mit der Kreisfrequenz ω rotierenden kugelförmigen Körpers.

Lösung

Übung 5.2-1

Gleichgewichtskonzentration an Leerstellen

1 Leite die nachstehende Formel für die Gleichgewichtskonzentration von Leerstellen in einem Kristall her:

$$c_r = \text{Häufigkeit von Leerstellen} = \exp\left(-\frac{E^F}{k_B T}\right)$$

- Beginne mit den Formeln in Script, benütze die Näherungen.
- *Hinweis*: Die Aussage, daß $N - n \approx N$, heißt *noch lange nicht*, daß $d(N - n)/dn \approx dN/dn = 0$!!.

2. *Für Spezialisten*: Würden kompliziertere Versionen der **Stirlingformel** bessere Ergebnisse liefern?

Lösung

Übung 2.3-1

Eigenschaften der Fermiverteilung

Gegeben sei die Fermiverteilung

$$f(E, T) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E - E_F}{kT}\right) + 1}$$

1. Zeige, daß das Aufweichungsintervall in etwa den Wert **4k*T*** hat.

Hinweis: Berechne die Steigung bei $E = E_F$ und die Schnittpunkte der Steigungsgerade mit $f = 0$ und $f = 1$.

2. Zeige, daß für $E >> E_F$ die Boltzmannnäherung gilt.

In anderen Worten: Für $E >> E_F$ kann $f(E,T)$ ersetzt werden durch

$$f(E,T) \approx \exp - \frac{E - E_F}{kT}$$

Für welchen Wert $E - E_F$ ist die Abweichung der Boltzmann-Näherung von der exakten Formel im Bereich **<10 %**? Was folgt daraus?

Lösung

© H. Föll

Übung 5.1-1

Schnelle Fragen zu

5.1. System, Temperatur, Energie und Entropie

- **Hier sind einige schnelle Fragen zu 5.1.1: Was ist ein System oder Ensemble?**
  - Vergleiche die Systeme: Einatomiges Gas, ein Sauerstoff - Stickstoff Gemisch (= Luft), einen einatomigen Kristall und das "*Elektronengas*" der freien Elektronen ein einem Metall bezüglich ihrer thermischen Energie.
  - Was besagt der Gleichverteilungsatz?
  - Was ist *Temperatur* ; d. h. welche Eigenschaft eines (thermodynamischen) Systems spiegelt sie wieder? Zusatzfrage für Schlaumeier: Was ist *Druck* in diesem Kontext?
  - Wie groß ist die thermische Energie eines (klassischen) Teilchens in einem Sytem in Formeln ungefähr? Wie groß ist der Zahlenwert bei Raumtemperatur?
  - Warum kann der Gleichverteilungssatz beim "Elektronengas" nicht gelten? Hinweis: Betrachte Energie und Zustände bei sehr tiefen Temperaturen.
- Was besagt der **1.** Hauptsatz:
  - In Worten, d.h. qualititativ?
  - In einer Bilanzformel, die die innere Energie U eines gegeben Körpers mit Wäremenergie Q und Arbeit W korreliert?
  - Was kann der **1.** Hauptsatz nicht leisten?

- **Hier sind einige schnelle Fragen zu 5.1.2: Der 2. Hauptsatz und die Entropie**
  - Was ist Entropie? Qualitativ und mit Grundformel.
- Betrachte n Leerstellen in einem Kristall aus N Atomen:
  - Diskutiere an diesem Beispiel die Begriffe "Makro-" und "Mikrozustand".
  - Wieviel Mikrozustände gibt es für $n = 2$ Leerstellen? Für n? Wie sieht dann die Entropieformel aus?
  - Wie lautet die Stirlingformel und warum ist sie so wichtig?
- Formuliere den **2.** Haupsatz:
  - Mindestens eine qualitative Formuliereung
  - Quantitativ (mit Vorgriff auf 5.2)?

Übung 5.2-1

Schnelle Fragen zu

5.2 Freie Energie und Minimierungsprinzip

Hier sind einige schnelle Fragen zu 5.2.1: Minimiere die freie Energie

- Wie ist *freie Energie* definiert? Warum kann diese Formel eine Balance zwischen minimaler Energie und maximaler Unordnung ausdrücken?
- Was ist das allgemeine Prinzip für einen *thermodynamischen Gleichgewichtszustand*?
- Warum braucht man bei sehr tiefen Temperaturen nur die Energie minimieren?
- Erkläre mit dem Prinzip der Minimierung der freien Energie warum Festkörper schmelzen.
- Erkläre qualitativ und mit Formeln, warum es sich für einen Kristall "lohnt" Energie zur Erzeugung für Leerstellen zu investieren, und wie das mit der Temperatur zusammenhängt.
- Erkläre qualitativ warum hohe Konzentrationen von extrinsischen atomaren Fehlstellen beim Abkühlen zu Ausscheidungen führen.

Hier sind einige schnelle Fragen zu 5.2.2: Berechnung der Leerstellenkonzentration und Verallgemeinerung

Schreibe mit Hilfe der *Stirlingformel* den folgenden Ausdruck für den Differentialquotient der Entropie von ***n*** Leerstellen in einem Kristall aus ***N*** Atome so um, dass differenziert werden kann

$$\frac{dS_n}{dn} = k \cdot \frac{d}{dn}\left(\ln N! - [\ln n! + \ln (N-n)!] \right)$$

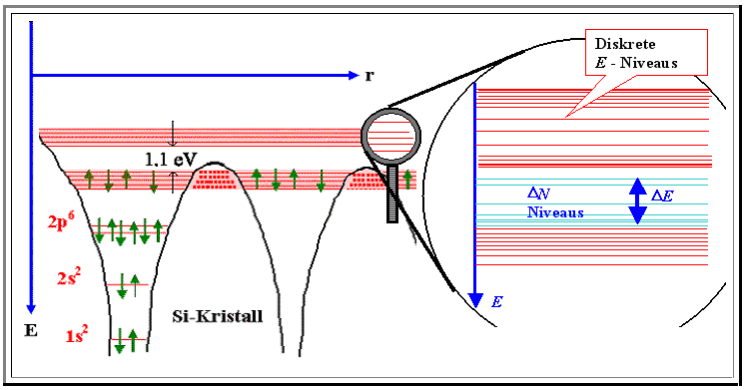
- Gebe die Formel für die Leerstellenkonzentration c_V in einem Kristall.
- Berechne die Konzentration dicht unterhalb des Schmelzpunktes für alltägliche Metalle. Schmelzpunkte findet man hier . Für Bildungsenergien nimmt man den typischen Wert von ????.
- Wie kann die Formel für die *Gleichgewichts*konzentration an Eigenzwischengitteratomen und extrinsischen Fremdatomen nur lauten? Was bedeutet in diesem Fall die Energie? Was bedeutet das für den Zustand eines Kristalls mit einer festen Konzentration eines Fremdatoms?
- Warum haben alle Kristalle bei hoher Temperatur das Bedürfnis zu verdrecken?

Übung 5.3-1

Schnelle Fragen zu

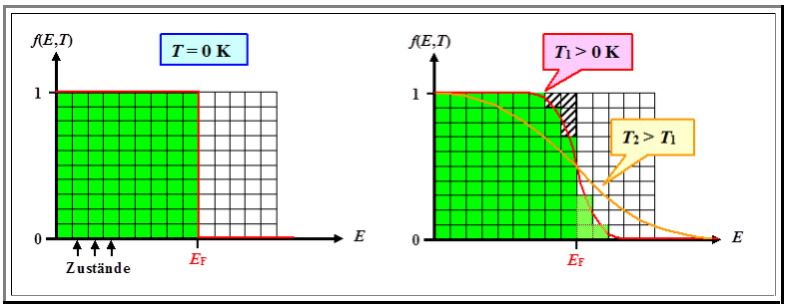
5.3 Zustandsdichten und Verteilungsfunktionen

- **Hier sind einige schnelle Fragen zu 5.3.1: Die Boltzmann Verteilung**
  - Wie kann man ein thermodynamisches System nur über Energie und Zuständ repräsentieren?
- Der Zentralbegriff ist Zustandsdichte:
  - Wie ist die Zustandsdichte definiert? Warum ist es eine doppelte "Dichte".
  - Was kann man über die Zustandsdichte eines klassischen einatomigen Gases sagen?
  - Wie ist das mit der Zustandsdichte in den Bändern im Bild unten?



  - Wie groß ist grundsätzlich und immer die Zahl (oder Dichten) an Teilchen, die auf dem Energieniveau ***E*** "sitzen"?
  - Wie groß ist demnach die Gesamtzahl (oder Dichte) an Teilchen, die sich in einem Energieband aufhalten das sich von von E_1 - E_2 erstreckt?
  - Warum muss es *zwei* Verteilungsfunktionen geben - aber auch nicht mehr als zwei?
  - Wie heißt die klassische Näherung an die beiden o.e. Verteilungsfunktionen und wie lautet die zugehörige Formel? In der Näherung, dass die meisten Teilchen auf dem Grundniveau E_0 "sitzen"?
  - Warum kann man die Formel für die Konzentration c_V an Leerstellen (oder anderen atomaren Defekten) und für die Sprungfrequenz ***r*** von Leerstellen (oder anderen atomaren Defekten) mit obiger Verteilung sofort hinschreiben?

- **Hier sind einige schnelle Fragen zu 5.3.2: Die Fermi-Dirac Verteilung**
- Diskutiere das nachfolgende Bild:



  - Wie groß ist die Zustandsdichte?
  - Welches Prinzip erzwingt bei ***T* = 0 K** die Verteilung der Teilchen (= Grüne Quadrate) wie gezeigt?
  - Was bedeutet die Fermienergie E_F im linken Bild?
  - Warum bestimmt das Prinzip der Minimierung der freien Energie zusammen mit den o.e. Prinzip die Form der Fermi-Dirac Verteilungsfunktion (Stufenfunktion wie gezeigt) bei ***T* = 0 K**
  - Wie groß die die Entropie der Anordnung bei ***T* = 0 K**? Wie kann man sie erhöhen bei gleichzeitiger Minimierung der Energie?
  - Wie bestimmt sich die *Fermienergie* E_F allgemeiner und eleganter als bei ***T* > 0 K**?

- Wie lautet die Formel für die Fermiverteilung?

Hier sind einige schnelle Fragen zu 5.3.3: Eigenschaften der Fermi Verteilung

- Wie breit ist die *Aufweichungszone* der Fermiverteilung?
- Wie kann man die Fermieverteilung für Energien einige **k*T*** oberhalb der Fernmienergie approximieren?
- Wie kann man in diesem Zusammenhang definieren, was "klassisches" Verhalten oder " klassische Teilchen" sind?
- Wenn bei einer Energie ***E*** der zugehörige Zustand **100**-fach entartet ist, und die Fermiverteilung **f(*E*; E_F, *T*)** den Wert **0,83** hat; wieviel Teilchen "sitzen" dann maximal auf diesem Energieniveau?
- Wie groß ist die *Wahrscheinlichkeit* , dass dieses Niveau *unbesetzt* ist?

Lösungen zur Übung 5.1-1

Illustration

Berechne die mittlere thermische Energie der nachfolgenden Systeme und ziehe Schlussfolgerungen wie angegeben. Über diesen Link kann man die benötigten Daten finden.

1. Luft bei **300 K**. Es genügt, Stickstoff und Sauerstoff im Verhältnis **80 : 20** zu betrachten; man darf dann auch eine mittlere Masse der Moleküle annehmen.

- Betrachte zunächst nur eine Komponente der Geschwindigkeit, z. B. $\mathbf{v_x}$. Bestimme daraus den Mittelwert von **v**. Diskutiere den erhaltenen Wert im Lichte bekannter Geschwindigkeiten.

Die Massen sind:

- Sauerstoff **O**: **16** atomare Einheiten (**u**) = $\mathbf{16 \cdot 1{,}7 \cdot 10^{-27}\ kg = 2{,}7 \cdot 10^{-26}\ kg}$.
- Stickstoff **N**: **14** atomare Einheiten = $\mathbf{14 \cdot 1{,}7 \cdot 10^{-27}\ kg = 2{,}4 \cdot 10^{-26}\ kg}$.

- Die Moleküle haben die doppelte Masse; für das Durchschnittsmolekül ergibt sich damit ca. $\mathbf{30 \cdot 1{,}7 \cdot 10^{-27}\ kg = 5.1 \cdot 10^{-26}\ kg}$.

Für Elektrotechniker, so steht's im Skript, reicht die ungefähre Beziehung $\boldsymbol{U_{therm} \approx kT}$, mit $\boldsymbol{U_{therm}(300\ K) \approx 1/40\ eV}$. Für eine Komponente der Geschwindigkeit haben wir dann **1/3** der thermischen Energie oder

- $\mathbf{\frac{1}{2} m v_x^2 = 1/120\ eV}$
  $\mathbf{v_x = (1\ eV/[60\ m])^{1/2} = 5{,}72 \cdot 10^{11} (eV/kg)^{1/2}}$
- Die Dimension $\mathbf{(eV/kg)^{1/2}}$ ist nicht unbedingt das, was man für Geschwindigkeiten erwartet, aber wir müssen nur die **eV** zu Joule (**J**) konvertieren (der Link hilft im Zweifel). Wir haben
  $\mathbf{1\ eV = 1{,}6 \cdot 10^{-19}\ J = 1{,}6 \cdot 10^{-19}\ kg \cdot m^2 \cdot s^{-2}}$ und erhalten damit
- $\mathbf{v_x = 5{,}72 \cdot {}^{11} \cdot (1{,}6 \cdot 10^{-19}\ kg \cdot m^2 \cdot s^{-2}/kg)^{1/2} = 229\ m/s}$

Für die Gesamtgeschwindigkeit **v** gilt $\mathbf{v^2 = v_x^2 + v_y^2 + {}^2 + v_z^2 = 3v_x^2}$ da alle drei Geschwindigkeitskomponenten gleich groß sein müssen.

- Damit ist $\mathbf{v = 3^{1/2} v_x = 396\ m/s}$

Na ja - die bekannte Schallgeschwindigkeit in Luft liegt so um **330 m/s**; wir sind mit dem obigen Wert da nicht so weit weg. Rechnet man genauer (mit Zahl der Freiheitsgrade = **5**) bekommt man die Schallgeschwindigkeit auch nicht viel besser raus - Details dazu in diesem Link.

In welcher Größenordung muss die Belichtungszeit einer (fiktiven) hochauflösenden Kamera sein, damit ein scharfes Bild entsteht? *Hinweis:* Während der Belichtunsgzeit sollte sich das Teilchen nur um einen Bruchteil seiner Dimension bewegt haben.

Ein Molekül ist etwa **1 nm** groß (es ist hier etwas kleiner). Damit es nicht verschwommen auf dem "Photo" erscheint, darf es sich höchstens um **0,1 nm** bewegen.

- Die maximale Belichtungszeit (gleich mit der richtigen Schallgeschwindigkeit) ist damit
  $\mathbf{t_{max} = 0{,}1\ nm \cdot s/330\ m = 3 \cdot 10^{-13}\ s}$.

Wie weit kommt ein Luftmolekül im Mittel, bevor es mit einem anderen Luftmolekül kollidiert? *Hinweis:* Mittlerer Abstand folgt aus Dichte und Molekülgewicht. Was folgt daraus für die mittlere Zeitdauer zwischen Kollisionen?

Die Dichte von "Luft" ist $\mathbf{1{,}3\ kg/m^3}$. In $\mathbf{1\ m^3}$ sind damit $\mathbf{1{,}3\ kg/5.1 \cdot 10^{-26}\ kg = 2{,}54 \cdot 10^{25}}$ "Luft"- Moleküle enthalten.

- Jedes Molekül hat damit $\mathbf{1/2{,}55 \cdot 10^{25}\ m^3 = 1/2{,}55 \cdot 10^{25} \cdot 10^{27}\ nm^3 = 39{,}3\ nm^3}$ Platz zur Verfügung. Der mittlere Abstand $\boldsymbol{d_{Mol}}$ zum nächsten Molekül ist damit
  $\mathbf{d_{Mol} = 23\ nm^{1/3}\ nm = 3.4\ nm}$
- Um diesen Abstand zurückzulegen braucht das Molekül im Mittel die Kollisionszeit
  $\mathbf{t_{Kol} = 3{,}4 \cdot 10^{-9}\ ms/330\ m = 1{,}03 \cdot 10^{-11}\ s}$.
  Um das Gewusel der Moleküle in einem Stück Luft zu "sehen", muss man also recht schnell gucken.

Berechne die mittlere thermische Energie der nachfolgenden Systeme und ziehe Schlussfolgerungen wie angegeben. Über diesen Link kann man die benötigten Daten finden.

2. Wasser bei **300 K**.

- Gehe analog zur Luftaufgabe vor.
- Berechne zusätzlich die ungefähre Rotationsgeschwindigkeit des Moleküls. *Hinweis:* Finde die Formel für die Energie eines mit der Kreisfrequenz ω rotierenden kugelförmigen Körpers.

Die Masse eines $\mathbf{H_2O}$ Moleküls ist $\mathbf{2\ u + 16\ u = 34\ u = 3{,}06 \cdot 10^{-26}\ kg}$. Damit kann man wie oben wieder die Geschwindigkeit rechnen. sie kann nicht sehr verschieden sein vom vorherigem Ergebnis.

Um die Rotationsgeschwindigkeit zu bekommen müssen wir etwas genauer hinschauen.

- Die Rotatiosnenergie $\boldsymbol{E_{rot}}$ einer homogen Kugel mit Radius $\boldsymbol{r}$, Masse $\boldsymbol{m}$ und Rotationsgeschwindigkeit ω ist gegeben durch $\boldsymbol{E_{rot} = 1/5 \cdot m \cdot \omega^2 \cdot r^2}$, oder $\omega = (5E_{rot}/mr^2)^{1/2}$.
- Mit $\boldsymbol{r = 0{,}3\ nm}$ (typische Atomgröße), thermische Energie in Elektrotechnik Näherung = $\mathbf{k}\boldsymbol{T} = \mathbf{1/40\ eV}$ bei Raumtemperatur und der Masse wie oben geben, erhalten wir $\omega = ((5/40\ eV)/\ 3{,}06 \cdot 10^{-26}\ kg \cdot 9 \cdot 10^{-2}\ nm^{-2})^{1/2}$.
- Wenn wir gleich noch die Umrechnung **eV - J** einsetzen, ergibt sich $\omega = ((5/40\ eV)/\ 3{,}06 \cdot 10^{-26}\ kg \cdot 9 \cdot 10^{-2}\ nm^{-2})^{1/2} \approx 1 \cdot 10^{12}\ s^{-1}$.
- Das sind recht hohe Drehraten im **THz** Bereich. Wir haben aber nicht sehr genau gerechnet, und für größere und schwerere Moleküle sind die Drehraten entsprechend kleiner - man kommt in den Mikrowellenbereich (**GHz**) und kann dort Molekülspektroskopie treiben!

Lösungen zur Übung 5.2-2

Illustration

- Als Lösung nehmen wir einfache die **Lösung** zu einer sehr ähnlichen **Aufgabe** aus dem "Defects" Hyperscript

Lösung zur Übung 5.3-1

Eigenschaften der Fermiverteilung

1. Zeige, daß das Aufweichungsintervall der Fermieverteilung in etwa den Wert **4k*T*** hat.

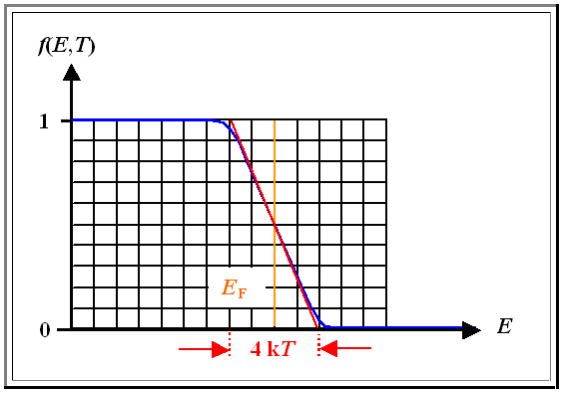
Die Ableitung der Fermieverteilung nach der Quotientenregel ergibt unmittelbar

$$\frac{df(E,T)}{dE} = -\frac{1}{kT}\,\frac{\exp(..)}{\{\exp(..)+1\}^2}$$

- Für $E = E_F$ wird der Exponent **= 1** und wir bekommen

$$\frac{df(E = E_F, T)}{dE} = -\frac{1}{4kT}$$

- Ersetzen wir die Fermiverteilung um E_F durch eine Gerade mit der Steigung **–(1/4k*T*)**, definiert sie gerade ein Aufweichungsintervall von **4k*T*** wie unten gezeigt.



2. Zeige, daß für $E >> E_F$ die Boltzmannnäherung gilt.

Für $E >> E_F$ *und* $(E - E_F) >> kT$ steht im Exponent eine Zahl **>> 1**

- Damit ist $\exp(E - E_F)/kT >> 1$ und die **+1** im Nenner kann vernachlässigt werden. Man erhält

$$f(E >> E_F, T) \approx \frac{1}{\exp(E - E_F)/kT} = \exp-(E - E_F)/k\,T$$

- Das ist die Boltzmannverteilung!

Für welchen Wert $E - E_F$ ist die Abweichung der Boltzmann-Näherung von der exakten Formel im Bereich **< 10 %**? Was folgt daraus?

- Mit $E - E_F = \Delta E$ haben wir.

$$\frac{\exp-\Delta E/kT}{\dfrac{1}{\exp\Delta E/kT + 1}} = 1.1 = 1 + \exp-\Delta E/kT$$

- Man erhält sofort

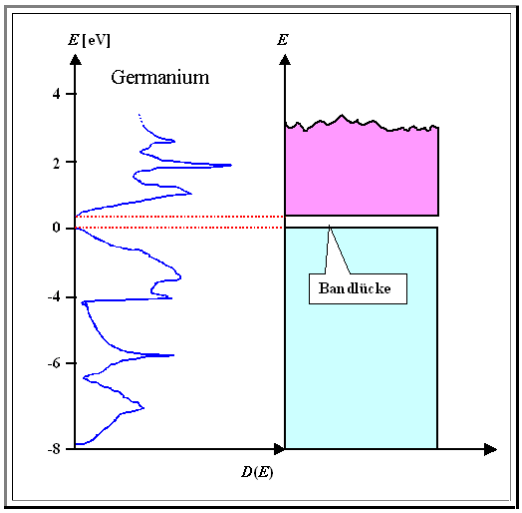
$$\Delta E \geq 2.3\ kT$$

- Sobald man also energetisch einige **k*T*** oberhalb der Fermienergie "sitzt", ist die Boltzmann-Näherung völlig OK.

Illustration

Zustandsdichte für Germanium

- Hier ist die Zustandsdichte von Germanium:

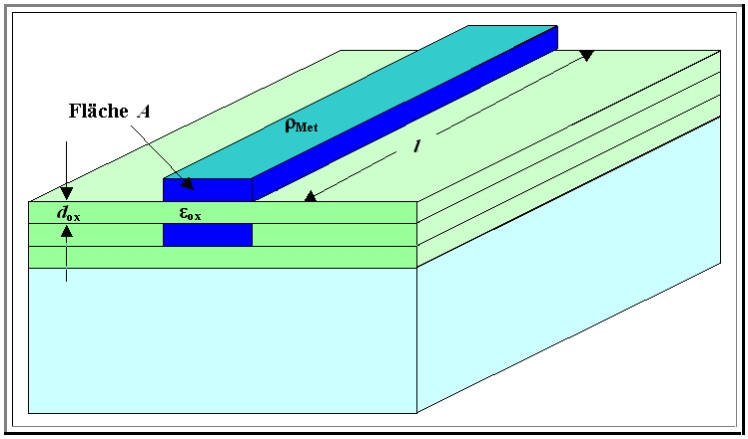


- Das Bild folgt exakt der Systematik wie im Hauptstrang gezeigt; es läßt nur die Potentialtöpfe weg und zeigt die beiden Bänder nur noch schematisch.
  - Sieht kompliziert aus; ist kompliziert. Man kann solche Kurven aber nicht nur relativ einfach messen, sondern heutzutage mit Quantentheorie und großen Computern auch ohne weiteres recht exakt *berechnen.*

Übung 6.1-2

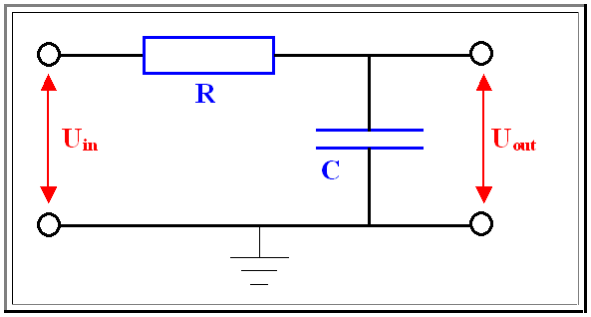
Signalverlauf im IC

Hier ist nochmals die in Kapitel 6.1.1 gezeigte Geometrie von Verbindungsleitungen in einer integrierten Schaltung

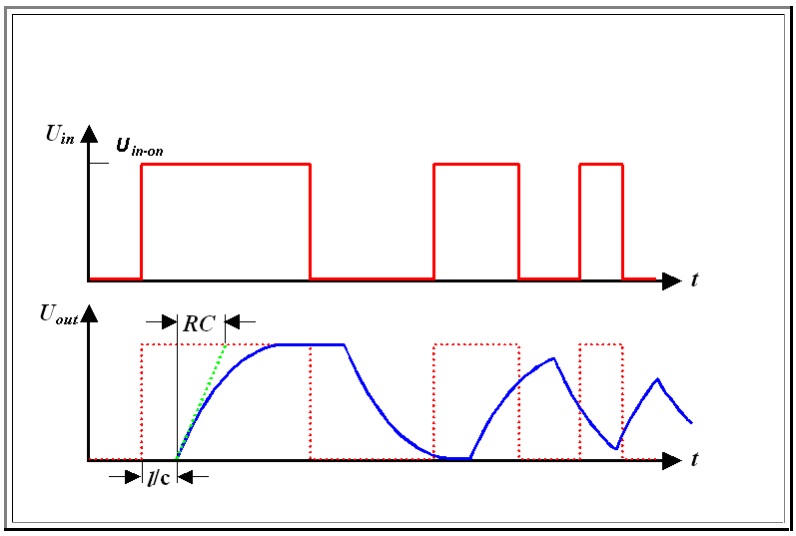


1 Zeige, dass damit folgendes Ersatzschaltbild gilt und berechne mit dem gegebenen Werten sowohl den Widerstand ***R*** als auch die Kapazität ***C***.

- Für den spezifischen Widerstand der Leiterbahn kann der Wert ρ **= 2 µΩcm** verwendet; für d_{Ox}, die Länge ***l*** und die Fläche ***A*** nehmen wir realistische Werte von **300 nm**, **1 mm** bzw. **0,1 µm** ^{2}; für die relative Dielektrizitätskonstante des Dielektrikums zwischen den Leiterbahnen gilt ϵ_{ox} **= 4**.



2. Zeige, dass sich bei Einspeisung eines Rechtecksignals am Eingang der Signalverlauf am Ausgang wie unten gezeigt ergibt.



- Hinweis: Die folgendeDifferentialgleichung gilt es zu lösen (Warum?)

$$I = C \cdot \frac{dU_{out}}{dt} = \frac{U_{in} - U_{out}}{R}$$

- Lösungen für die Fälle: Spannung "rauf" oder Spannung "runter" sind (Warum?):

$$U_{out} = U_{in\text{-}on} \cdot \{1 - \exp - (t/RC)\}$$

$$U_{out} = U_{in\text{-}on} \cdot \exp - (t/RC)\}$$

3. Diskutiere:

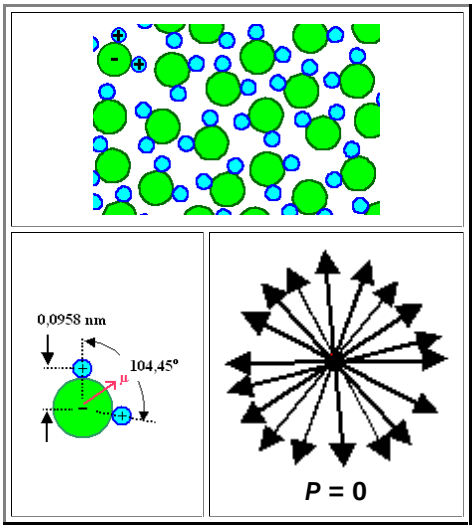
1. Die Bedeutung der Zeitkonstanten $\tau = RC$ für die maximale Taktfrequenz von integrierten Schaltungen.
2. Die mögliche Beziehung der errechneten Zeitkonstante des Beispiels zu derzeitigen Taktfrequenzen realer Chips.
3. Mögliche Maßnahmen zur Verringerung dieser Zeitkonstanten unter Berücksichtigung der Eigenschaften *realer* Materialien.

Lösung

Übung 6.3-1

Wassereigenschaften

Hier ist nochmals das in Kapitel 6.3.1 gezeigte "Wasserbild":



Frage 1: Wie schnell rennen die Wassermoleküle im Mittel durch die Gegend (bei **0 °C** und **100 °C**)

Frage 2: Wie groß ist der mittlere Abstand zweier Wassermoleküle? (Die Dichte von Wasser ist **1 kg/l**)

Frage 3: Wie kurz muss die Belichtungszeit für ein scharfes Bild sein? Wie lange wird es im Mittel ungefähr dauern, bis zwei Moleküle kollidieren?

- Wer die vorhergehende Aufgabe gemacht hat ist natürlich besser dran

Lösung

Übung 6.1-1

Schnelle Fragen zu 6.1

Warum Dielektrika wichtig sind

- **Schnelle Fragen zu 6.1.1: Statische Feldstärke und Stromdichte**
- Erstmal einige Fragen um den Begriff der *Feldstärke*:
  - Was sind *typische* elektrische Feldstärken in den Materialien *typischer* elektrischer Geräte und Komponenten? *Hinweis*: man überlege, wie die dick die Isolation spannungsführender Teile ist oder "gefühlt" sein sollte. Man kann sich auch fragen, wie dick der Handschuh sein sollte, mit dem man eine **100 V**, **1.000 V** oder **100.000 V** Leitung anfassen würde.
  - Was sind so *ungefähr* die höchsten Feldstärken, die ein Material aushält.? *Hinweis* : Man betrachte das Bild in Kap. 6.1.1 genau, bedenke die typische Spannung bei der ein ***IC*** betrieben wird, und dass man heute bei den Dimensionen wohl schon ein bißchen weiter ist.
  - Was passiert eigentlich, wenn die Feldstärke "zu hoch" wird?
- Jetzt zur *Stromdichte*.
  - Die typische Sicherung für eine Steckdose unterbricht bei **16 A**. Die Kabel in den Wänden haben einen Querschnitt von ca. *????* **mm^2**. Was sagt das über die maximale Stromdichte in den Leitungen? Oder unterbricht die Sicherung aus einem anderen Grund als zu hohe Stromdichte?
  - Nimmt man den spezifischen Widerstand der obigen Leitung zu **2 µΩcm** und die Leitungslänge zu **(10 - 100) m**, dann bleibt kurz vor dem Rausfliegen der Sicherung wieviel elektrische Leistung in der Leitung "hängen"?
- Noch einige allgemeine Fragen:
  - Was bestimmt das Produkt ***RC*** bei einer (langen) Leitung? Was für Materialparameter werden damit bei integrierten Schaltungen kritisch?
  - Wie lautet die Formel für die Kapazität ***C*** eines Plattenkondensators?
  - Was verbindet die *Optik* mit den Dielektrika? Wie lautet die wesentliche Formel dazu?
  - Nenne mindesten drei Produkte / Anwendungsbereiche, in denen die Dielektrizitätskonstante ϵ wichtig ist.

- **Schnelle Fragen zu 6.1.2: Was wir über Dielektrika gerne wissen möchten**
  - Nenne (halbwegs richtig) die Dielektrizitätskonstanten von Wasser und mindesten zwei festen Materialien.
  - Wie groß ist der Brechungsindex von Wasser - ungefähr? Der höchste bekannte Brechungsindex ist? (welches Material?)
  - Warum ergibt sich aus den Antworten der obigen Fragen, dass die Dielektrizitäts *konstante* keine ist - in Bezug auf die Frequenz?
  - Gib ungefähr (Größenordnung) die *Frequenz* an von:
    - Radio (**MW** / **UKW**).
    - Handies.
    - Mikrowelle.
    - Radar.
    - Licht.
    - Vibrierende Atome im Kristall.

Übung 6.2-1

Schnelle Fragen zu 6.2

Elektrischer Durchbruch

Hier sind einige schnelle Fragen zum elektrischen Durchbruch

- Zeichne die Strom(dichte) - Feldstärke Kennlinie eines Dielektrikums inkl. Durchbruch. Wie oft kann man mit einem Material diese Kennlinie messen?
- Gib Zahlen für typische Durchbruchsfeldstärken. Minimal muss man die Größenordnung der max. Durchbruchsfelstärke wissen.
- Erkläre kurz diese Durchbruchmechanismen:
    - Thermischer Durchschlag.
    - Lawinendurchbruch.
    - Lokale Entladungen.
    - Elektrolytischer Durchschlag.
- Warum ist elektrischer Durchbruch auch ein Problem für die Lebens- oder Betriebsdauer von elektrischen Geräten?

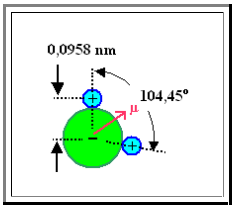
Übung 6.3-1

Schnelle Fragen zu

6.3 Polarisation und Polarisationsmechanismen

Schnelle Fragen zu 6.3.1: Ein paar wichtige Begriffe und Definitionen

- Wie ist ein (elektrisches) Dipolmoment definiert? Welche dielektrische Materialien habe permanente Dipolmomente durch ihre Bausteine?

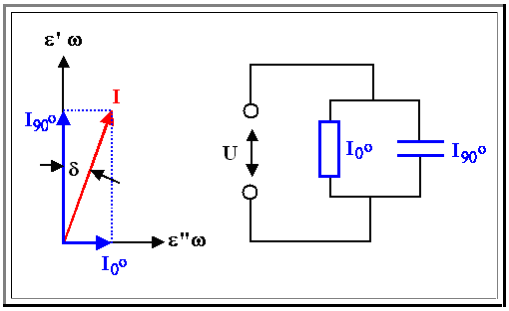


- Ein Wassermolekül hat ein permanentes Dipolmoment von **1,84 Debye**.(1 Debye = **3,33564 · 10^{-30} Cm**); die Geometrie ist wie im Bild gegeben.
- Wenn man das Molekül durch einen Dipol ersetzt, wie groß ist dann ξ und der Betrag der Ladung am Ende?

- Was ist die Polarisation ***P*** eines Dielektrikums mit Volumen ***V***?
- Wie ist das elektrische Feld ***E*** und die Polarisation ***P*** verknüpft? Wie lautet die Beziehung für elektrisches Feld ***E*** und Verschiebungsdichte ***D***? Welche *zwei* Materialkonstanten resultieren und wie sind sie verknüpft?

Schnelle Fragen zu 6.3.2: Verallgemeinerung des Begriffs "Dielektrikum"

- Wieso und wie beschreibt das nachfolgende Diagramm ein *reales* Dielektrikum? Wie würde ein *ideales* Dielektrikum aussehen?



- Vervollständige die folgende Gleichung für ein Wechselfeld in einem idealen Kondesator mit der Kreisfrequenz ω und ziehe Schlüsse bezüglich der Wirk- und Blindleistung.

$$j(\omega) = \frac{dD}{dt} = \epsilon(\omega) \cdot \frac{dE}{dt} = ???$$

- Was muß man tun, um die Parallelschaltung von Kondensator und Widerstand mit dem Ergebnis der obigen Gleichung elegant zu "erschlagen"?
- Erkläre und definiere die *dielektrische Funktion* .
- Diskutiere die folgende Gleichung insbesondere mit Hinblick auf *Wirk*- und *Blindleistung* und mit Bezug zum obigen Ersatzschaltbild.

$$j(\omega) = \omega \cdot \epsilon'' \cdot E(\omega) + i \cdot \omega \cdot \epsilon' \cdot E(\omega)$$

Schnelle Fragen zu 6.3.3: Polarisationsmechanismen

- Was bedeutet *Grenzflächenpolarisation* ? Diskutiere (mit Skizze) warum z. B. Korngrenzen in ionischen Kristallen nahezu unvermeidlich Ladungen / Dipolmomente besitzen.
- Was versteht man unter *Atom*- or *Elektronenpolarisation* . Wie werden in diesem Falle Dipole induziert? Was kann man über die Stärke, d. h. die resultierende **DK** (oder Suszeptibilität) dieses Polarisationsmechanismus sagen?
- Beschreibe die Materialien und Umstände, die zur *ionischen Polarisation* führen. Warum kommt für die Polarisation ***P*** des Materials der **E**-Modul (hier ***Y*** genannt) ins Spiel?
- Was versteht man unter *Orientierungspolarisation* ? Warum funktioniert dieser Polarisationsmechanismus *nicht* in Festkörpern, aber sehr gut in Flüßigkeiten?
- Wie groß ist qualitativ der Grad der Ausrichtung von Wassermolküldipolen im elektrischen Feld und was verhindert ggf., dass er sehr hoch wird? Was folgt daraus qualitativ für die Temperaturabhängigkeit der **DK** von Wasser?
- Welcher funktionale Zusammenhang ergibt sich in allen drei Fällen für die Polarisation als Funktion der Feldstärke?

Übung 6.4-1

Schnelle Fragen zu

6.4 Frequenzabhängigkeit der Dielektrizitätskonstanten

Schnelle Fragen zu 6.4.1: Der Grundversuch

- Über welche Frequenzbereiche ist die Frequenzabhängigkeit der Dielektrizitätskonstanten interessant? Gib einige Zahlen (Größenordnungen) für Frequenzen zusammen mit dem passenden Stichwort.
- Wie misst man die frequenzabhängige **DK**, insbesondere bei sehr hohen Frequenzen?
- Wie hängen "Optik" und Elektro- und Informationstechnik zusammen? Gib mindestens drei Beispiele.
- Wie kommt man von der dielektrischen Funktion zum komplexen Brechungsindex?

Schnelle Fragen zu 6.4.2: Der Frequenzgang der (komplexen) Dielektrizitätskonstanten für Resonanz

Erst einige Fragen zu den Grundlagen resonanter Systeme:

- Was sind die Grundbedingungen für ein *resonantes* System. Gib Beispiele aus dem täglichen Leben; nicht notwendigerweise aus der Elektrotechnik.
- Diskutiere jeden Term der folgenden Grundgleichung für das einfachste resonante System. Wie könnte die technische Realisierung aussehen?

$$m \cdot \frac{d^2x}{dt^2} + k_F \cdot m \cdot \frac{d\,x}{d\,t} + k_S \cdot x = q \cdot E_0 \cdot \cos(\omega t)$$

- Skizziere Amplitude und Phase als Funktion der (log) Frequenz mit der Dämpfung als Parameter. Wo liegt die Resonanzfrequenz (Formel ohne Dämpfung reicht aus).
- Zeichne die Amplitude über die Zeit als Funktion der Dämpfung. Wie kann man in diesem Bild die Dämpfungskonstante k_F (**F** steht für "Friction") direkt erkennnen?
  Hinweis : Dimension von k_F anschauen.
- Schreibt man die Lösung als *komplexe* Amplitude $x(\omega) = x'(\omega + x''(\omega)$, sehen Real- und Imaginärteil von $x(\omega)$ wie aus?

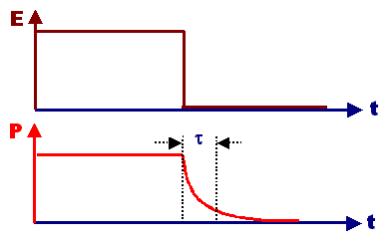
Jetzt zur dielektrischen Funktion.

- Welche der drei Polarisationsmechanismen (wir vernachlässigen die Grenzflächenpolarisation) erfüllt alle Bedingungen für ein resonantes System?
- Woher kommt die erregende Kraft, und was zieht zurück?
- Welcher Polarisationsmechanismus wird die höchste Resonanzfrequenz haben, und warum?
- Erwarten wir hohe oder niedrige Dämpfung bei Resonanz, und warum?
- Skizziere Real- und Imaginärteil der dielektrischen Funktion für einen resonanten Mechanismus.
- Was folgt daraus für den Brechungsindex ($n(\omega)$ im Bereich der Resonanz, und wieso kann man damit durch Kombination zweier verschiedener "Gläser" "chromatisch korrigierte" Linsen herstellen?

Schnelle Fragen zu 6.4.3: Der Frequenzgang der (komplexen) Dielektrizitätskonstanten für Relaxation

- Erkläre wie die nachfolgende Kurve und Formel die *Relaxation* der Orientierungspolarisation beschreibt.

$$P(t) = P_0 \cdot \exp - \frac{t}{\tau}$$



- Wie kommt man von einer Funktion der Zeit zur Funktion der Frequenz?
- Zeichne den Real- und Imaginarteil der dielektrischen Funktion für *Wasser* als Funktion der (log) Frequenz; für den Realteil mit Zahlen an den Achsen. Bei welcher Frequenz liegt - ungefähr - das Maximum des Imaginärteils?
- Beschreibe die Funktionsweise einer "Mikrowelle".

Schnelle Fragen zu 6.4.4: Gesamtschau

- Skizziere Real- und Imaginärteil der dielektrische Funktion für ein Material mit allen **4** Polarisationsmechanismen. Gib ungefähre Frequenzen in interessanten Bereichen.
- Warum kann es *kein* Material geben, das dieses Verhalten zeigt?
- Was besagt (in Worten) die *Kramers-Kronig Relation*?
- Wie sähe das Ersatzschaltbild eines idealen Dielektrikums aus? Welche Teile der dielektrischen Funktion beschreiben die Komponenten? Wie muss dieses Ersatzschaltbild erweitert werden, wenn das Dielektikum nicht ideal ist, d.h. eine **DC** Leitfähigkeit besitzt?
- Warum folgt daraus, dass die dielektrische Funktion die gesamten elektrischen Eigenschaften jedes Materials beschreiben kann?

Übung 6.5-1

Schnelle Fragen zu

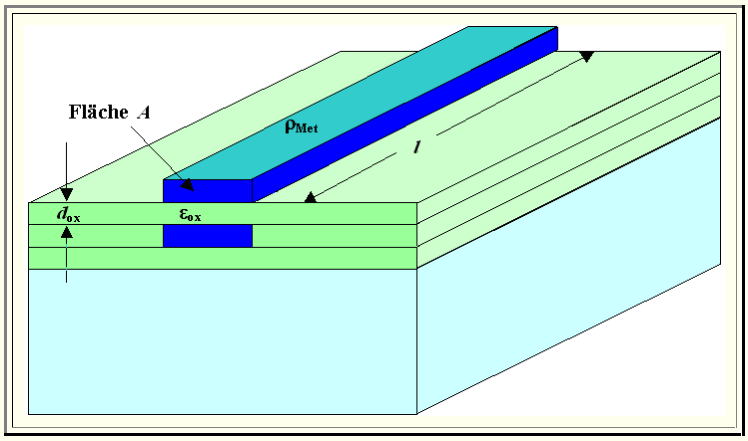
6.5 Optik mit komplexem Brechungsindex

- **Schnelle Fragen zu 6.5.1: Was man wissen möchte und was man wissen kann**
- Es gibt im Grunde nur einen Fragekomplex: Treffen sich eine elektromagnetische Welle im Frequenzbereich **$5 \cdot 10^{15}$ Hz** und ein Dielektrikum. Sagt das Dielektrikum: Soll ich dir mal meine dielektrische Funktion zeigen?...
  - In welcher Größenordnung liegen Frequenz, Photonenenergie und Wellenlänge des sichtbaren Lichts?
  - Welche Gleichung verknüpft Frequenz und Wellenlänge im Vakuum oder in einem Material?
  - Ein Lichtstrahl fällt auf ein (dielektrisches) Material. Mit welchen Größen beschreibt man die "Input" Situation?
  - Was kann allenfalls passieren? Gib Größen für die Intensitäten.
  - Wie beschreibt man die Absorption (Generelle Formel für Feldstärke oder Intensität als Funktion der Tiefe)? Welche Konstante taucht auf? Warum hat die Gleichung dieselbe Funktionalität wie die generelle Relaxation ?
    Hinweis: Intensität kann auch als Zahl der Photonen beschrieben werden.
  - Welche Eigenschaften beschreibt jeweils der Real- und der Imaginärteil des komplexen Brechungsindex?
  - Warum gibt es kein ***UV*** oder Röntgenmikroskop mit Linsen?

Lösung zur Übung 6.1-1

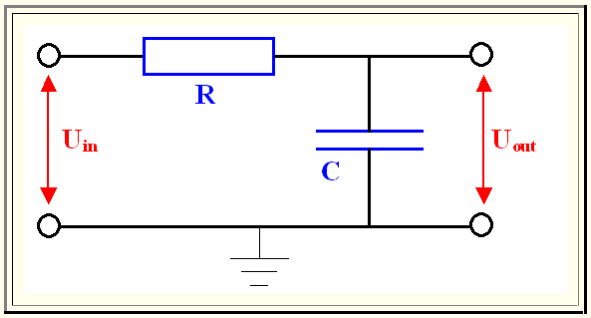
Signalverlauf im IC

Hier ist nochmals die in Kapitel 6.1.1 gezeigte Geometrie von Verbindungsleitungen in einer integrierten Schaltung



1 Zeige, dass damit folgendes Ersatzschaltbild gilt und berechne mit dem gegebenen Werten sowohl den Widerstand ***R*** als auch die Kapazität ***C***.

- Für den spezifischen Widerstand der Leiterbahn kann der Wert ρ **= 2 µΩcm** verwendet; für d_{Ox}, die Länge ***l*** und die Fläche ***A*** nehmen wir realistische Werte von **300 nm**, **1 mm** bzw. **0,1 µm** ^{2}; für die relative Dielektrizitätskonstante des Dielektrikums zwischen den Leiterbahnen gilt ϵ_{ox} **= 4**.



Dass das gezeigte Ersatzschaltbild vorliegt ist trivial und muss Elektrotechnikern (hoffentlich) nicht erklärt werden.

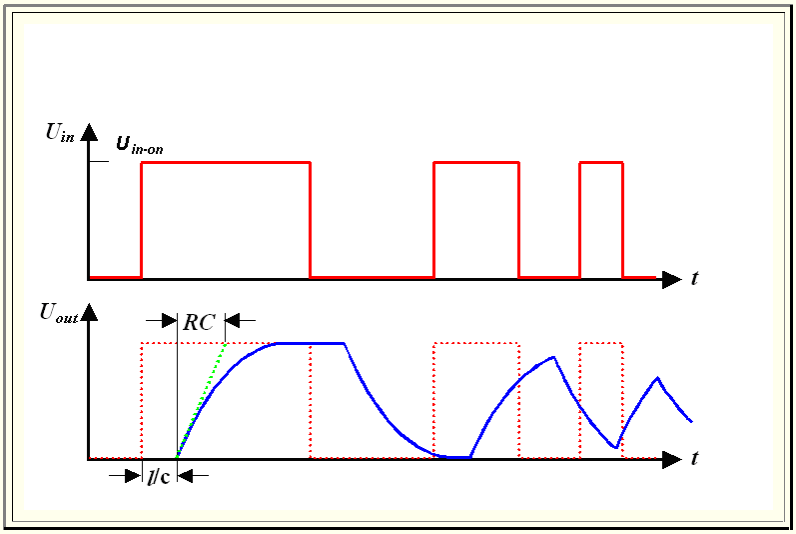
- Für den Widerstand ***R*** gilt
  $R = \rho l/A = 2 \cdot 10^{-6} \cdot 0{,}1 / 0{,}1 \cdot 10^{-8}\ \mathrm{cm^2 \Omega cm \cdot cm \cdot cm^{-2}} = 200\ \Omega$.
- Für die Kapazität des simplen Plattenkondensators haben wir:
  $C = \epsilon_0 \epsilon_0 \cdot (\text{Fläche})/d_{Ox}$.
- Die Fläche ist nicht unmittelbar klar, aber sie ist **=** ***l*** **·** ***x*** mit ***x*** nach Zeichnung ermittelbar aus $x \cdot 1/5x = 0.1\ \mu m^2$; damit $x \approx 0{,}7\ \mu m$.
- Damit erhalten wir
  $C = [(8{,}8 \cdot 10^{-12}\ \mathrm{A \cdot s \cdot V^{-1} \cdot m^{-1}}) \cdot (4) \cdot (0{,}7 \cdot 10^{-6}\ \mathrm{m}) \cdot (1 \cdot 10^{-3}\ \mathrm{m})]/[300 \cdot 10^{-9}\ \mathrm{m}] = 8{,}21 \cdot 10^{-14}\ \mathrm{A \cdot s \cdot V^{-1}}$
- Da wir wissen, das $1\ \mathrm{A \cdot s \cdot V^{-1}} = 1\ \mathrm{F}$, haben wir eine Kapazität von **82 fF** (**f** = femto = 10^{-15}).

Die unten benötigte Zeitkonstante $\tau = RC$ ergibt sich damit zu

- $\tau = 200\ \Omega \cdot 82 \cdot 10^{-15}\ \mathrm{F} = 1{,}64 \cdot 10^{-11}\ \mathrm{V \cdot A^{-1} \cdot A \cdot s \cdot V^{-1}} = 1{,}64 \cdot 10^{-11}\ \mathrm{s} = 16{,}4 \cdot \mathrm{ps}$.
- Die maximale Grenzfrequenz liegt damit bei **61 GHz**.

Da der ganze Chip um die **10 GHz** "können" soll, und die Grenzfrequenz eines Chips mit vielen Millionen Transistoren und entsprechend vielen Verbindungsleitungen immer nur deutlich schlechter sein kann als die eines einzelnen Elements, erkennen wir jetzt: Wir haben mit ***RC*** ein *massives* Problem.

2. Zeige, dass sich bei Einspeisung eines Rechtecksignals am Eingang der Signalverlauf am Ausgang wie unten gezeigt ergibt.



- Hinweis: Die folgendeDifferentialgleichung gilt es zu lösen (Warum?)

$$I = C \cdot \frac{dU_{out}}{dt} = \frac{U_{in} - U_{out}}{R}$$

- Lösungen für die Fälle: Spannung "rauf" oder Spannung "runter" sind (Warum?):

$$U_{out} = U_{in\text{-}on} \cdot \{1 - \exp-(t/RC)\}$$

$$U_{out} = U_{in\text{-}on} \cdot \exp-(t/RC)\}$$

Na ja - Wir haben $C = Q/U$ oder $dU_{out} = dQ/C$ sowie $I = R/I$ und $I = dQ/dt$. Damit ergibt sich zwanglos $dU_{out}/dt = \tau^{-1} \cdot (U_{in} - U_{out}(t))$

- Der Rest ist klar. Für den Fall $U_{in} = 0$ und die Randbedingung $U_{out}(t = 0) = U_0$ haben wir die typische "Relaxationsgleichung " vom Typ $dy/dt = -\lambda t$ mit der Lösung $y = y_0 \exp-\lambda t$

3. Diskutiere:

1. Die Bedeutung der Zeitkonstanten $\tau = RC$ für die maximale Taktfrequenz von integrierten Schaltungen.
2. Die mögliche Beziehung der errechneten Zeitkonstante des Beispiels zu derzeitigen Taktfrequenzen realer Chips.
3. Mögliche Maßnahmen zur Verringerung dieser Zeitkonstanten unter Berücksichtigung der Eigenschaften *realer* Materialien.

Der erste und zweite Punkt ist oben schon erledigt.

- Die Zeichnung macht klar, warum das so ist: Sind die Eingangssignale zu schnell, kommt die Ausgangsspannung gar nicht mehr richtig runter.

Der dritte Punkt wird teuer. Was kann man tun?`Es gibt nur zwei Möglichkeiten: **1.** ***R*** kleiner machen und **2. C** kleiner machen (und dann natürlich ggf. beides kombinieren).

Zunächst zu ***R***.

- ***R*** könnten wir kleiner machen indem wir die *Geometrie* der Leitung optimieren. Die Querschnittsgröße muss sich aber nach den Chipstrukturgrößen richten, sie wird also im Laufe der Jahre zwangsläufig immer *kleiner* werden! Der Chip selber wird aber immer größer, d. h. die Länge der Leitung würde auch immer größer werden, falls man nicht beim Chipdesign höllisch aufpaßt.
- Damit bleibt bei Geometrie nur noch die **Mehrlagenmetallisierung** mit "nach oben" immer gröberen Strukturen (und dadurch kleinerem ***R***). Wie so was dann aussieht sieht man im Link, der im übrigen auf ein Skript führt in dem auch der **ET&IT** Studierende sich mal schnell die Grundlagen der Halbleiter*technologie* anschauen kann.

- Wie steht's mit dem spez. Widerstand ρ? Bis ca. **2000** nahm man **Al** als Leiterbahnmaterial, mit einem (nominellen) $\rho_{Al} = 2{,}7 \cdot 10^{-6}\ \Omega$**cm**. Das geht noch etwas besser, mit **Ag** kommt man auf den absolut tiefsten Wert von $\rho_{Ag} = 1{,}63 \cdot 10^{-6}\ \Omega$**cm**; **Cu** liegt bei $\rho_{Cu} = 1{,}7 \cdot 10^{-6}\ \Omega$**cm**. Darunter kommt nichts mehr, das wissen wir jetzt!
- Man ist tatsächlich auf **Cu** umgeschwenkt um eine Verbesserung um den Faktor **1,6** mitzunehmen. Das hat viele Jahre Arbeit und Investitionen in Milliardenhöhe erfordert, denn bei dem Metallisierungsmaterial muss man auch noch viele andere Eigenschafen genau "richtig" haben.

Was machen wir um die "parasitäre" Kapazität ***C*** zu verringern?

- Bei der Geometrie hilft einerseits was bei ***R*** schadet, nämlich Leiterbahnen lateral kleiner machen, andererseits sind kürzere Längen natürlich auch hier gut. Beim "Kleinermachen" muss man aber auch noch bedenken, dass die Kapazitäten zu lateral verlaufenden Nachbarleiterbahnen (oben nicht eingezeichnet) dadurch größer werden; außerdem tendieren die Dicken der isolierenden Schichten dazu, kleiner zu werden - nicht gut. Viel kann mit Geometrieoptimierung also nicht erreichen; außerdem muss man das recht komplexe Gesamtoptimum im Auge behalten.
- Bleibt die Verwendung eines Dielektrikums mit $\epsilon_{ox} << 4$, ein sogenanntes "low **k** material" (ausgesprochen (deutsch) "keh") . Nach vielen Jahren Forschung und wohl > 1 Milliarde $ oder € Aufwand, hat es aber noch keine Firma geschafft, ein wirklich verwendbares "low k material" in die Anwendung zu bringen. Der derzeitige Favorit ist poröses SiO_2 .
- Deswegen (aber nicht nur deswegen), ist die max. Taktfrequenz bei Mikroprozessoren seit Jahren bei einigen **GHZ**, machdem sie von ca. **1990 - 2002** von **30 MHz** auf **4 GHz** gestiegen ist.

Lösung zur Übung 6.3-1

Wassereigenschaften

Frage 1: Wie schnell rennen die Wassermoleküle im Mittel durch die Gegend (bei **0 °C** und **100 °C**)

- Wer die vorhergehende Aufgabe gemacht hat ist natürlich besser dran

Schaun' mer halt mal: In der Lösung für Übung 5.1-1 "Mittlere thermische Energien" finden wir für die Gechwindigkeit die Formel:
$\frac{1}{2} m v_x^2 = 1/120$ **eV**

- Mit der Masse von $H_2O = (2 \cdot 1)u + 16u = 18u$ (u = **atomare Masseneinheit**
$= 18 \cdot 1{,}7 \cdot 10^{-27}$ **kg** = $3{,}06 \cdot 10^{-27}$ **kg**. Damit erhalten wir in "Elektrotechnik Näherung"
$v_x = (1\ eV/[60\ m])^{1/2} = 3{,}13 \cdot 10^{12}\ (eV/kg)^{1/2}$.
- Mit $1\ eV = 1{,}6 \cdot 10^{-19}\ J = 1{,}6 \cdot 10^{-19}\ kg \cdot m^2 \cdot s^{-2}$ erhalten wir
$v_x = (1\ eV/[60\ m])^{1/2} = 1\,250\ m/s$
- Ein Wassermolekül ist leichter als ein "Luftmolekül", deswegen ist es im Mittel schneller.

Frage 2: Wie groß ist der mittlere Abstand zweier Wassermoleküle? (Die Dichte von Wasser ist **1 kg/l**)

Die Masse eines Wassermoleküls ist $18 \cdot 1{,}7 \cdot 10^{-27}$ **kg** = $3{,}06 \cdot 10^{-26}$ **kg** .

- In **1 kg** (oder $1\ l = 10^3\ cm^3 = 10^3\ cm^3 = 10^{24}\ nm^3$) sind demnach
$3{,}27 \cdot 10^{25}$ Wassermoleküle. Jedes paßt in einen Würfel der Größe $10^{24}\ nm^3 / 3{,}27 \cdot 10^{25} = = 3{,}06 \cdot 10^{-2}\ nm^3$
Der mittlere Abstand entspricht der Kantenlänge dieses Würfels, also **0,313 nm**
- Die Größe eines (kugelförmig gedachten) Moleküls entnehmen wir aus dem Bild zu ziemlich genau $0{,}2\ nm = 10^{-8}$ **cm**. Das wäre auch der geringstmögliche Abstand. Die Moleküle sitzen also schon recht dicht aufeinander.

Frage 3: Wie kurz muss die Belichtungszeit für ein scharfes Bild sein? Wie lange wird es im Mittel ungefähr dauern, bis zwei Moleküle kollidieren?

Na ja. Die Moleküle müpssen gerade mal so um **0.1 nm** laufen, bevor sie in einen Nachbarn rennen

- Die "dielektrische Realxationszeit" t_{diel} (so nennt man das hier) liegt also um
$t_{diel} = 0{,}1 \cdot 10^{-9}\ m / 1\,250\ m/s = 8 \cdot 10^{-14}\ s \approx 10^{-13}\ s$ - was ja immer schon behauptet wurde!
- Die Belichtungszeiten für unsere "Momentaufnahmen" müßten noch kürzer sein für ein scharfes Bild wie "gemalt" - so um $10^{-15}\ s = 1fs$. Das Symbol "**f**" steht für **femto = 10^{-15}** .
- Jezt wissen wir auch, warum die "**Femtosekundenspektroskopie** " in den letzten 10 Jahren sehr populär geworden ist - man kann damit solche Vorgänge zeitaufgelöst anschauen - und warum in Forschungskreisen, in denen Geld keine primäre Begrenzung ist, jetzt die *Atto*sekundenspektroskopie angefangen wird (**1 as = 10^{-18} s**

Illustration

Das Licht

Hier sind die wesentlichen Daten des sichtbaren Lichtes:

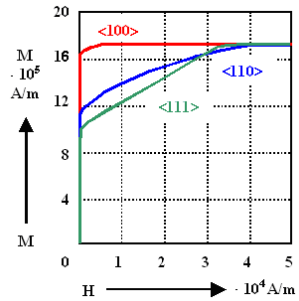
Farbton	Wellenlänge nm	Frequenz $\times 10^{14}$ Hz	Energie eV
Violett	380 – 420	7,9 – 7,1	3,3 – 2,9
Blau	420 – 490	7,1 – 6,1	2,9 – 2,5
Grün	490 – 575	6,1 – 5,2	2,5 – 2,2
Gelb	575 – 585	5,2 – 5,1	2,2 – 2,1
Orange	585 – 650	5,1 – 4,6	2,1 – 1,9
Rot	650 – 750	4,6 - 4,0	1,9 – 1,6
"Mittelwert"	**500**	**5**	**2,5**

Übung 7.2-1: Magnetische Momente von Fe, Ni und Co

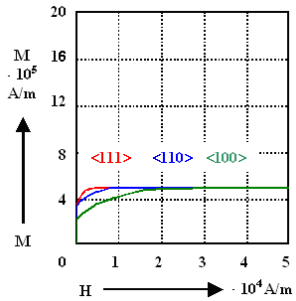
Illustration

Das nachgfolgende Bild zeigt die Magnetisierungskurven von einkristallinem **Fe**, **Ni** und **Co**

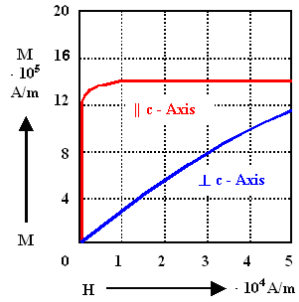
- Die Kurven gehen bis zu sehr große Feldstärken; die Hystereseeigenschaften sind dehalb kaum zu sehen und nicht eingezeichnet.



Anisotropie der Magnetisierung in **Fe**.



Anisotropie der Magnetisierung in **Ni**.



Anisotropie der Magnetisierung in **Co**.

Anisotropie der *quantitativen* Magnetisierung in **Fe** (***bcc*** Gitter), **Ni** (***fcc*** Gitter), and **Co** (***hcp*** Kristall).

Die Frage ist: kann man von diesen Kurven die magnetischen Momente der **Fe**, **Ni** und **Co** Atome errechnen? In Einheiten eines Bohrschen Magnetons, natürlich.

- *Hinweis*: Dichten, Gitterkonstanten etc. findet man hier.

Link zur Lösung

Übung 7.3.1 Maximale Magnetisierung

Welche Magnetisierung ist für Permanentmagnete maximal erreichbar?

- Betrachte sinnvolle magnetische Moment pro Atom und realistische Atomdichten.
- Vergleiche mit der Figur der Materialentwicklung für Permanentmagnete.

Illustration

Link zur Lösung

Übung 7.1-1

Schnelle Fragen zu

7.1.1 Magnetische Dipole und Arten des Magnetismus

Hier sind einige schnelle Fragen zu 7.1.1: Monopole, Dipole und Kreiströme

Was für ein *magnetisches Moment* $\boldsymbol{m = I \cdot A}$ hat ein Elektron im Wasserstoffatom, das auf der **1.** Bohrschen Bahn kreist?

- *Hinweise:*
  1. Das Bohrsche Atommodell kennt man - sonst hier nachlesen.
  2. *Ansonsten*: Man schreibt einfach mal Strom mal Fläche hin - für ein Elektron auf einer Kreisbahn mit Radius $\boldsymbol{r}$ und Winkelgeschwindigkeit ω.
  3. Dann erinnert man sich an die Definition des Drehimpulses $\boldsymbol{L = m^*_e \cdot \omega \cdot r^2}$ ($\mathbf{m^*_e}$ = Masse des Elektrons) und dass Herr Bohr ihn gequanteltet hat, d. h. $\boldsymbol{L = n \cdot \hbar}$, mit $\boldsymbol{n = 1, 2, 3, 4, \ldots}$ = Quantenzahl (oder Nummer der Kreisbahn); $\hbar$ ist, wie bekannt, $\mathbf{h/2\pi}$ und **h** ist selbstredend das Plancksche Wirkumsquantum.
- Schon sollten wir haben: Das kleinstmögliche magnetische Moment ist:
  $\mathbf{m_{min} = m_{Bohr} = h \cdot e \;\; / \; 4\pi \cdot m^*_e \;=\; 9.27 \cdot 10^{-24}\ Am^2}$

Was kann man zu dem magnetischen Moment eines Atoms sagen?

- Woher stammt es? Was ist i.d.R. der dominierende Effekt?
- Haben Atome mit ungeradzahliger *Ordnungszahl* (z. B. alle Alkalimetalle und Halogenid) ein magnetisches Moment oder nicht? Wie ist das wohl bei Alkali-Halogenid *Molekülen* oder Kristallen?
- Wohin können die magnetischen Momente $\underline{\boldsymbol{m}}$ vom magnetischen Atomen in Kristallen (z. B. **Al**, **Cu**, **Ag**, ...) grundsätzlich zeigen - im Gegensatz zu den elektrischen Dipolmomenten der $\mathbf{H_2O}$ Basis z. B einem Wasserkristall?
- Wohin zeigen sie in nicht-magnetischen, d.h. paramagnetischen Materialien? Hinweis: Wir groß ist die magnetischePolarisation, d.h $\Sigma\ \underline{\boldsymbol{m}}$ in diesen Materialien?

Was sind ferro*elektrische* Materialien und was haben sie mit Ferro = Eisen zu tun?

Hier sind einige schnelle Fragen zu 7.1.2: Dia-, Para-, and Ferromagnetismus

Zuerst zu den Begriffen

- Was ist die *magnetische Feldstärke* $\boldsymbol{H}$? Wie wird sie gemessen, d.h. welche Maßeinheit hat sie?
- Was ist die *magnetische Induktion* $\boldsymbol{B}$ im Vakuum? In einem Material? Welche *Materialkonstante* kommt dann ins Spiel?
- Wie definiert man sinnvoll und in Analogie zu den Dielektrika die magnetische Polarisation $\boldsymbol{J}$? Wie schreibt man damit den Zusammenhang zwischen $\boldsymbol{B}$, $\boldsymbol{H}$ und $\boldsymbol{J}$? Wie kommt man von $\boldsymbol{J}$ zur schreibtechnisch einfacheren Magnetisierung $\boldsymbol{M}$?
- Sofern man einem linearen Zusammenhang zwischen $\boldsymbol{M}$ und $\boldsymbol{H}$ unterstellt, hat man einen *neuen* Materialparameter der wie heißt, und mit der oben postulieren alten Materialkonstanten wie zusammenhängt?

Jetzt zur Klassifizierung magnetischen Verhaltens

- Dia- und Paramagnetismus beschreibt was?
- Wie wichtig sind dia- oder paramagnetische Eigenschaften für **ET&IT** Produkte?
- Was für Arten von Ordnung in den magnetischen Momenten sind prominent? Wie wichtig sind sie für die Technik? Welche wichtigen oder paradigmatischen Materialien zeigen die jeweilige Ordnung?
- Was geschieht, wenn $\mathbf{k}\boldsymbol{T}$ größer wird als die Energie der Wechselwirkung zwischen benachbarten magnetischen Momenten?
- Was geschieht bei der Curietemperatur?
- Was macht diese Materialien speziell: $\mathbf{Nd_2Fe_{14}B}$ or $\mathbf{Sm_2Co_{17}}$?

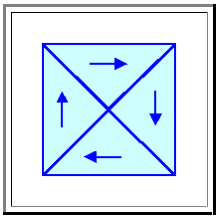
Übung 7.2-1

Schnelle Fragen zu

7.2.1 Ferromagnetismus und magnetische Domänen

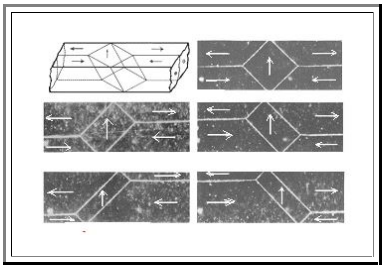
Hier sind einige schnelle Fragen zu 7.2.1: Energieminimierung und Domänen

- Wie sieht ein ferromagnetisches Material aus, das nur so rumliegt (d. h. sich halbwegs im thermodynamischen Gleichgewicht befindet)? Warum?
- Welche Energien werden durch Domänen optimiert? Was geht in die Energiebilanz ein?
- Was ist eine *leichte Richtung* ?
- Zeichne schematisch Domänen in einen Einkristall, der **4** oder nur **2** leichte Richtungen hat. Wie sieht das bei einem Polykristall aus (Zeichne **3 - 5** Körner mit verschiedener Orientierung). Welches ferromagnetische Material hat wohl nur **2** leichte Richtungen und warum?

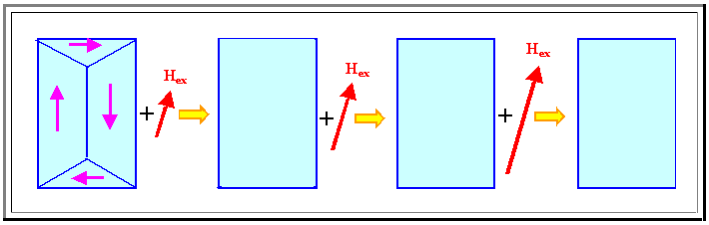


- Was ist *Magnetostriktion*?
- Zeichne für die gegebene Domänenstruktur ein, wie der Kristall auf Grund von Magnetostriktion aussehen würde, wenn man ihn gedanklich entlang der Domänenwände aufschneidet.
- Welche Einfluss hat Magnetostriktion auf Domänenstrukturen und Domänenbewegung?

- Was sind Domänenwände? Wie kann man ihre Eigenschaften näher beschreiben? Prinzipskizze dazu.
- Zeichne im nachfolgenden Bild die ungefähre Richtung und Stärke des externen Magnetfeldes ein.



- Zeichne im nachfolgenden Bild die Magnetisierungsstruktur mit anwachsendem Feld und markiere entsprechende Punkte in einem Magnetisierungs ***M*** - Magnetfeld ***H*** Diagramm (Neukurve in einer Hysteresekurve).



- Beschreibe die Bewegung von Domänenwänden und was daraus alles folgt.
- Was beschreibt der Begriff "magnetische Sättigung"?
- Warum spielen magnetische Materialien in der Optik keine Rolle? Warum benutzt man nie die eigentlich richtige Formel für den Brechungsindex $n = (\epsilon_r \cdot \mu_r)^{1/2}$?

Hier sind einige schnelle Fragen zu 7.2.2: Magnetische Verluste

- Welche zwei grundsätzlich verschiedene magnetische Verlustmechanismen treten auf?
- Welche Vor- und Nachteile haben Ferrite (typischerweise Oxide) im Vergleich zu Metallen?
- Wie bekämpft man beide Verlustarten in Trafos mit Eisenkernen? Zwei Skizzen!
- Warum sind die von Dielektrika her bekannten Verlustmechanismen ("Imaginärteil" der dielektrische Funktion) bei magnetische Materialien unwichtig?

Übung 7.3-1

Schnelle Fragen zu

7.3.1 Technische Nutzung des Ferromagnetismus

Hier sind einige schnelle Fragen zu 7.3.1: Hart- und weichmagnetische Materialien und 7.3.1 Anwendungen außer magnetische Speicher

- Wie unterscheiden sich hart- und weichmagnetische Materialien? Wie würden sie idealerweise aussehen (Skizze).
- Was sind die paradigmatischen Anwendungen von hart- und weichmagnetischen Materialien?
- Was gibt es sonst noch an Anwendungen für magnetische Materialien? Was sind die Anforderungsprofile dazu?
- Erläutere die wichtigen Parameter einer Hystersekurve und wodurch sie bedingt sind.
- Wie groß ist ungefähr **1 bit** auf einem modernen magetischen Speichermedium. Was für Anforderungen folgen für Lesen / Schreiben an Material und Perpherie?
- Wie kann man Hysteresekurven "einstellen"? Was für grundsätzliche Möglichkeiten gibt es um die o.g. Parameter gezielt einzustellen?
- Bei der magnetischen Datenspeicherung treten *unvermeidliche* Verluste auf (d .h. zum Speichern wird Energie benötigt). Begründe das "unvermeidlich" auf zwei getrennte Weisen: **1.** mit Grundanforderungen an das magnetische Material. **2.** Durch Betrachtung der Entropie vorher / nachher ("Vorher heißt, alle bits enthalten **1** oder **0** völlig statistisch oder "random").

Lösung zur Übung 7.2-1

Illustration

Die Frage war. Kann man von den gegebenen Magnetisierungskurven die magnetischen Momente der **Fe**, **Ni** und **Co** Atome errechnen? In Einheiten eines Bohrschen Magnetons, natürlich.

Einfach - mit ein paar kleinen Tricks

Zuerst besorgen wir und die wesentlichen Daten:

- Gitter **Fe**: **bcc**; Gitterkonstante **a = 2.86 Å**; atomare Dichte ρ_A**(Fe) = 2/0.286^3 Atome/nm^3 = 85.5 Atome/nm^3**
- Gitter **Nifcc**; Gitterkonstante **a = 3.52 Å**; atomare Dichte ρ_A**(Ni) = 4/0.352^3 Atome/nm^3 = 91.7 Atome/nm^3**
- Gitter **Co**: **hex**; Gitterkonstanten **a = 2.51 Å, c = 4.0 7Å**; Atomare Dichte ρ_A**(Co) = 2/[½ · c · a^2 · 3^{½} Atome/nm^3 = 90.1 Atome/nm^3**

Dannn erkennen wir, dass die gezeigten Kurven die maximale Magnetisierung wiedergeben, d.h. alle magn. Momente sind perfekt in Feldrichtung ausgerichtet. Damit können wir die folgenden Zahlen für die Sättigungsmagnetisierung m_{Sat}generieren :

- m_{Sat}**(Fe) = 17 · 10^5 A/m**
- m_{Sat}**(Fe) = 5 · 10^5 A/m**
- m_{Sat}**(Fe) = 14 · 10^5 A/m**

Die Einheit ist jedoch **A/m**, nicht was wir brauchen. Offenbar müssen wir die Einheit umwandeln - aber in was?

Wenn wir ein Bohrsches Magneton, m_{Bohr}, betrachten, haben wir

$$m_{Bohr} = 9.27 \cdot 10^{-24}\ \mathrm{Am}^2$$

Wir brauchen offenbar die Einheit **Am^2**. Das bekommt man, indem man die **A/m** mit **m^{-3}** multipliziert - damit wird dann klar, dass m_{Sat} prom^3 gegeben ist, wie es ja wohl für eine spezifische Größe auch sein sollte!

Die magnetischen Momente m_A pro Atom sind damit:

$$m_A = \frac{m_{Sat}}{\rho_A}$$

Was wir erhalten ist:

$$m_A(\mathrm{Fe}) = \frac{17 \cdot 10^5\ \mathrm{A/m}}{85.5\ \mathrm{Atome/nm}^3} = \frac{17 \cdot 10^5}{85.5}\ \frac{\mathrm{A} \cdot 10^{-27}\ \mathrm{m}^3}{\mathrm{m}} = 1.98 \cdot 10^{-23}\ \mathrm{A/m}^2 = 2.14\ m_B$$

$$m_A(\mathrm{Ni}) = 5.45 \cdot 10^{-24}\ \mathrm{A/m}^2 = 0.588\ m_B$$

$$m_A(\mathrm{Co}) = 1.55 \cdot 10^{-23}\ \mathrm{A/m}^2 = 1.67\ m_B$$

Das ist doch ein interessante Ergebnis! Es ist zunächst befriedigend, da wir gute Zahlen in der Nähe eines Bohrschen Magnetons erhalten. Es ist aber auch herausfordernd, denn die Zahlen sind nicht dicht an **1**, **2** oder auch **3**, wie man naiv erwarten könnte.

Wie kann **Ni** z. B. ein magnetisches Moment von **0.588 m_B** haben, und ein **Fe** Atom eines von **2.14 m_B**, wenn man bedenkt, dass ein Elektron immer nur exakt eins hat?

Zwei Möglichkeiten können wir dazubetrachten:

1. Unsere Rechnung ist etwas daneben
2. Es gibt noch so ein paar bisher nicht diskutierte Effekte, die das magnetische Moment eines Atoms *in einem Kristall* beeinflussen.

Die erste Möglichkeit schliessen wir aus, denn in Standardtextbüchern wie z. B. im "*Kittel*" finden wir die folgenden Zahlen für m_A :

- m_A**(Fe) = 2.22 m_B**

- **m_A(Ni) = 0.606 m_B**
- **m_A(Co) = 1.72 m_B**

Nicht identisch zu den unseren, aber doch dicht drauf. Nun gut, die Zahlen im Kittel sind für **T = 0 K**, während unsere aus **T = 300 K** Messungen stammen (und deshalb ein bißchen kleiner sein sollten)

- Wir haben also offenbar noch ein paar bisher nicht diskutierter Effekte. Was kommt in Frage? Hier ist eine kurze Liste:

  - Es könnte eine Wechselwirkung zwischen "Spin"-Moment und "Bahnmoment" geben.
  - Die freien Elektronen im Metall "spüren" die geordnete Spinstruktur der noch am Atom gebundenen Elektronen und ordnen iher Spins bis zu einem gewissen Grad jetzt auch.

- Das alles gibt's; es können damit sogar große Effekte entstehen. Dysprosium (**Dy**), zum Beispiel, ist ein Ferromagnet unterhalb seiner (technisch witzlosen) Curietemperatur von **88 K**. Seine Atome haben dann ein magnetisches Moment von gigantischen **m_A(Dy) = 10.2 m_B**; resultierend aus einer optimalen Kombination von Spin- und Bahnmomenten

Lösung zur Übung 7.3.1

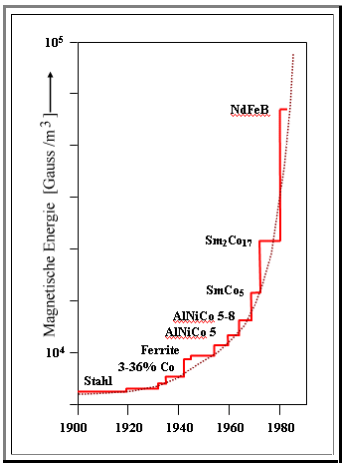
Illustration

- Überraschung! Keine Lösung hier. Selber machen; ist sehr lehrreich.

Illustration

Permanentmagnete

- Der Fortschritt bei Permanentmagneten demonstriert sehr schön, was die Materialwissenschaft in dieser Beziehung tun kann.
  - Hier ist eine Graphik die zeigt wie die "Stärke" von Permanentmagneten über die Jahrzehnte anstieg:



  - Nicht schlecht. Wir kommt man aber Exoten wie Kobalt - Samarium oder Neodym - Eisen - Bor Verbindungen? Jedenfalls nicht durch unsystematisches Rumprobieren.
- Allerdings haben diese Materialien auch einige Nachteile. Hier ist eine Tabelle:

Permanentmagnete			Relat. Energieprodukt	Relat. Koerzitiv-feldstärke	Arbeits-temperatur	Curie-temperatur	Anmerkungen
	Ferrite	Strontiumferrit	1	~3,1	< 250 °C	~450 °C	Wenig kräftig, hart und spröde, leicht entmagnetisierbar
		Bariumferrit	~1,1	~4,8			
	Aluminium-Nickel-Cobalt	AlNiCo (500)	~1,4	1	< 400 °C	~890 °C	Wenig kräftig, sehr leicht entmagnetisierbar
Seltene-Erde-Magnete	Samarium-Cobalt	$SmCo_5$ (18)	~6	~13,5	< 250 °C	~720 °C	Kräftig, hart und spröde
		Sm_2Co_{17} (24)	~8	~14,8		~800 °C	
	Neodym-Eisen-Bor	NdFeB (35)	~11	~17	< 120 °C	~310 °C	Sehr kräftig, hart und spröde, oxidieren leicht
Das Energieprodukt ist ein Gütewert. Die Koerzitivfeldstärke gibt die Feldstärke an, die einen Magneten entmagnetisiert.							

http://www.wundersamessammelsurium.de/Magnetisches/XtraPermanent/index.html

- Geht das jetzt immer so weiter? Wenn wir Aufgabe 7.3.1 gemacht haben, kennen wir die Antwort auf diese Frage.

Übung 8.1-1

Bestimme typische Zahlenwerte für die Beweglichkeit

1. Errechne einige typische Werte für die Beweglichkeit **μ** für Metalle

Die folgende Tabelle hilft mit einigen Zahlen für Leitfähigkeiten **σ** und Ladungsträgerkonzentrationen ***n***. Die letzte Spalte ignorieren wir erst mal

2. Betrachte dann typische Feldstärken für Metalle (einfach passende Stromdichten wählen) und berechne daraus die Größenordnung für die Driftgeschwindigkeiten $\mathbf{v_D}$.

Werkstoff	**ρ [Ω cm]**	**σ [Ω^{-1} cm^{-1}]**	**n_e [m^{-3}]**
Supraleiter ($T < T_C$)	0	∞	-
Silber Ag	$1{,}6 \cdot 10^{-6}$	$6.2 \cdot 10^{5}$	$\approx 10^{29}$
Kupfer Cu	$1{,}7 \cdot 10^{-6}$	$5.9 \cdot 10^{5}$	$\approx 10^{29}$
Blei Pb	$21 \cdot 10^{-6}$	$4.8 \cdot 10^{4}$	
Si (undotiert)	$2.3 \cdot 10^{5}$	$4.3 \cdot 10^{-6}$	$\approx 10^{16}$
Si (dotiert)	0,01 - 100	10^{-2} - 10^{2}	10^{20} — 10^{24}
Quarz	10^{16}	10^{-16}	≈ 0
Vakuum	∞	0	0

Solution

Übung 8.1-2

Berechne Zahlen für v_0, v_D, τ und l der freien Elektronen

- Wir berechnen mal die wesentlichen Daten der freien Elektronen in Metallen unter der Annahme, dass sie *klassische Teilchen* sind. (Das sind sie *nicht* – aber wir schauen mal, was die Ergebnisse dazu sagen.)
- **1. Aufgabe:** Berechne die mittlere thermische Geschwindigkeit $v_0(T)$ *klassischer* Elektronen.
  - Für die durchschnittliche Geschwindigkeit $v_0(T)$ klassischer Elektronen hatten wir (Gleichverteilungssatz)

$$\tfrac{1}{2} m v_x^2 = \tfrac{1}{2} k_B T$$

Daraus

$$v_0 = \left(\frac{3 k_B T}{m} \right)^{1/2}$$

- **2. Aufgabe:** Berechne die mittlere Stoßzeit τ der Elektronen.
  - Für die Stoßzeit τ, die mittlere Zeit zwischen zwei Stoßereignissen, galt

$$\tau = \frac{\sigma \cdot m}{n \cdot e^2}$$

- **3. Aufgabe:** Berechne die obere Grenze für eine Driftgeschwindigkeit v_D der Elektronen – indem wir eine sehr hohe Feldstärke von E = 100 V/m = 1 V/cm nehmen.
  - Als Formel für die Driftgeschwindigkeit v_D hatten wir

$$v_D = - \frac{E \cdot e \cdot \tau}{m}$$

- **4. Aufgabe:** Berechne die mittlere freie Weglänge l.
  - Für die mittlere freie Weglänge l folgt dann automatisch (und für $v_D = 0$, um es einfach zu machen):

$$l = v_0 \cdot \tau$$

- Wir brauchen natürlich Zahlen für die Konzentration n der freien Elektronen un dfür spezifische Leitfähigkeiten σ .
  - Für Metalle gehen wir mal davon aus, dass von jedem Atom **1** Elektronen ins "freie Elektronengas" geht. Hier sind ein paar Daten für die Berechnung (die sollte man übrigens schon mal gemacht haben).
  - Also erst mal die freie Spalte in der Tabelle ausfüllen.

Atom	Dichte [kg · m^{-3}]	Atomgewicht [1,66 · 10^{-27} kg]	spezif. Leitfähigk. σ [10^7 Ω^{-1} · m^{-1}]	atomare Konzentration n [m^{-3}] ???
Na	970	23	2,4	
Cu	8.920	64	5,9	
Au	19.300	197	4,5	

- Wie oft, paßt's bei den Maßeinheiten nicht auf Anhieb; also umrechnen.

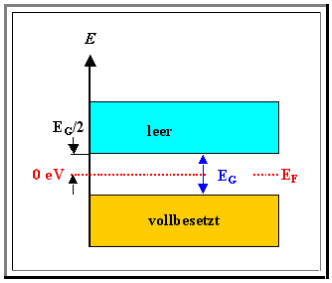
- Hinweis: Die Konversion von **eV** zu **J** anschauen (sowie die von Ω zu **V** und **A**).

Lösung

Übung 8.3-1

Ladungsträgerdichten im Leitungsband von Halbleitern

Gegeben sei die folgende extrem vereinfachte Bandstruktur:



Wir wollen damit ein bißchen den Umgang mit *Fermiverteilung* und *Ladungsträgerdichten* üben.

1. Frage: Der spezifische Widerstand typischer Halbleiter liegt um **(1 - 1.000)** Ω**cm**; typische Beweglichkeiten liegen im Bereich **μ = (500 - 5.000) cm²/Vs**.

Wir nehmen an, dass nur Elektronen im Leitungsband (dem nominell leeren Band) zur Leitung beitragen können.Welche *Ladungsträgerdichten* braucht man dazu im Leitungsband?

Die notwendigen Ladungsträger müssen per *thermischer Energie* aus dem vollbesetzten Valenzband den Sprung ins Leitungsband geschafft haben. Für **Si** gibt es im Leitungsband schon "ganz unten" Platz für ca. $\mathbf{N_{eff} = 3 \cdot 10^{19}}$ Elektronen pro $\mathbf{cm^3}$ (Man nennt das: "*effektive Zustandsdichte*").

Angenommen, die Fermienergie ist genau in der *Mitte* einer Bandlücke der Größe E_G (wir setzen darauf dann den Energienullpunkt). Dann ist die:

2. Frage: Wie groß muss die Energielücke bei Raumtemperatur **(T_R = 300 K)** sein, damit die richtige Ladungsträgerkonzentration resultiert? Wie groß bei **100 K** oder **500 K**?

Vergleiche die Ergebnisse der exakten Formel (= Fermiverteilung) mit der Boltzmann-Näherung.

3. Frage: Wähle in Gedanken eine Temperatur, bei der genau *ein* Elektron den Sprung vom Valenzband ins Leitungsband schafft. Vergleiche die Wahrscheinlichkeiten, dass genau *ein* Platz im Valenzband *nicht* besetzt ist, mit der Wahrscheinlichkeit,dass genau *ein* Platz im Leitungsband besetzt ist. Begründe damit, warum die Fermienergie genau in der *Mitte* der Bandlücke liegen muss!

Lösung

Übung 8.3-2

Massenwirkungsgesetz

Wir haben die Gleichungen aus dem Rückgrat:

Dichte n_e^L der mit Elektronen besetzten Plätze im Leitungsband

$$n_e^L = N_{eff} \cdot \exp - \frac{E_L - E_F}{kT}$$

Dichte n_h^V der Löcher, also der *nicht* besetzen Plätze im Valenzband

$$n_h^V = N_{eff} \cdot \exp - \frac{E_F - E_V}{kT}$$

Massenwirkungsgesetz = $n_e^L \cdot n_e^L$

$$n_e^L \cdot n_h^V = N_{eff}^2 \cdot \exp - \frac{E_L - E_V}{kT} = \text{const.}(T)$$

1. Frage: Wie kommt man auf die Dichte n_h^V der Löcher, also der *nicht* besetzten Plätze im Valenzband?

- Zeige, wie man mit Fermiverteilung und der Mathematik der Boltzmann-Näherung die obige Formel erhält.
- Stelle das Ganze graphisch dar und diskutiere mit Hilfe der Graphik, warum die (immer positive) "Energiebarriere" im *Boltzmannfaktor* die Form $E_F - E_V$ haben *muss*.

2. Frage: Leite das Massenwirkungsgesetz her. Für welche Werte der Fermienergie E_F gilt es?

Lösung

Übung 8.1-1

Schnelle Fragen zu

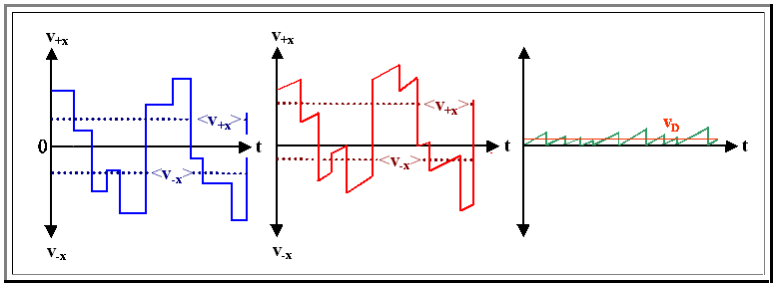
8.1 Leitfähigkeit, Konzentration und Beweglichkeit

Schnelle Fragen zu 8.1.1: Ein neuer Blick auf's Ohmsche Gesetz

- Leite das Ohmsche Gesetz wie im Rückgrat angegeben mit den spezifischen Größen $\boldsymbol{j}$, $\boldsymbol{E}$ und σ her.
- Wie berechnet man die Dichte der **Atome/cm^3** aus der Massendichte (**g/cm^3**) und der Kenntnis der Atomsorte(n)? Was folgt daraus *ungefähr* für die Dichte von *freien* Elektronen in Metallen?
- Wie groß ist die Stromdichte $\boldsymbol{j_{Ti}}$ von Teilchen der Sorte $\boldsymbol{i}$ mit der Konzentration $\boldsymbol{n_i}$, die sich mit der Durchschnittsgeschwindigkeit $\mathbf{v_D}$ bewegen (z.B. Wasser im Schlauch, Autos auf der Autobahn, Elektronen im **Cu**)? Wie groß ist die elektrische Stromdichte, falls die Teilchen ein Ladung $\boldsymbol{q}$ tragen? Gleichung!
- Leite mit der obigen Gleichung und mit dem Ohmschen Gesetz für die Stromdichte $\boldsymbol{j}$ und elektrische Feldstärke $\boldsymbol{E}$ die Hauptgleichung $\sigma = q \cdot n \cdot \mu$ für die spez. Leitfähigkeit her sowie die Definition der *Beweglichkeit* μ.
- Gib Größenordnungen für den spez. Widerstand von guten Metallen, Halbleitern und Isolatoren.
- Wenn man für ein typisches Metall die Dichte der freien Ladungsträger (d. h. Elektronen) = Dichte Atome setzt, und einen spez. Widerstand von **(2 - 50)** $\mu\Omega$**cm** annimmt, wie groß sind dann typische Beweglichkeiten? Gleichung und Zahlen.

Schnelle Fragen zu 8.1.2: Mittlere freie Weglänge, Stoßzeit und Beweglichkeit

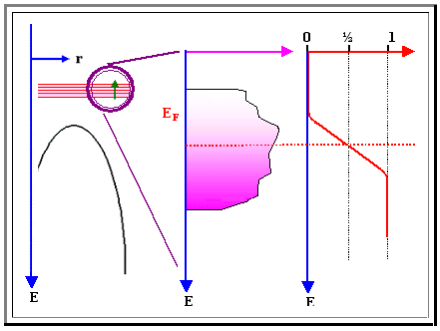
- Warum werden Elektronen in einem Metall auf die ein elektrisches Feld $\boldsymbol{E}$ wirkt, nicht immer schneller und schneller, sondern bewegen sich feldbedingt mit der konstanten Driftgeschwindigkeit $\mathbf{v_D} = \mu \cdot \boldsymbol{E}$ (parallel oder antiparallel?) zum Feld (μ = Beweglichkeit der Elektronen im gegebenen Metall).
- Wie schnell, d. h. mit welcher mittleren Geschwindigkeit $\mathbf{v_{therm}}$, würden sich Elektronen als *klassiche* Teilchen in einem Metall bei der Temperatur **T** bewegen? Formel!
  Hinweis : Aus Sicht des Gleichverteilungssatz sind Elektronen identisch zu einem "einatomigen" Gas.
- Wie vergleicht sich $\mathbf{v_{therm}}$ bei Raumtemperatur und $\mathbf{v_D}$ bei einer "vernünftigen" Feldstärke ganz grob (aus dem Gedächtnis oder rechnen).
- Mit was stoßen sich Elektronen in Kristallen bevorzugt? Mit welchen zwei Parametern beschreibt man solche Stoßprozesse?
- Interpretiere die nachfolgende Bildsequenz. Welcher Stoßparameter ist direkt sichtbar?



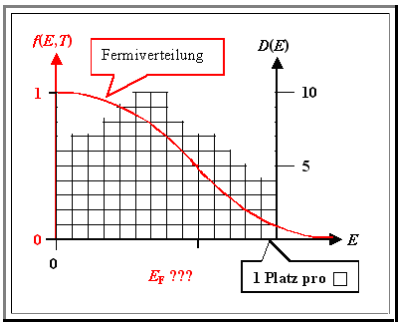
- Die Beweglichkeit μ hängt wie mit den oben gefragten Stoßparametern zusammen? (qualitativ; Proportionalitäten).
- In der Formel $\boldsymbol{l} = \mathbf{v} \cdot \boldsymbol{t}$, die ein *klassisches* Elektron in einem Metall das bei der Temperatur $\boldsymbol{T}$ nur so rumliegt in der Zeit $\boldsymbol{t}$ zurücklegt, ist welche Geschwindigkeit einzusetzen? Was ändert sich, wenn man jetzt noch ein elektrisches Feld einschaltet?
- Für eine bekannte Leitfähigkeit und Elektronendichte kann man für *klassische* Elektronen über die Beweglichkeit die mittlere freie Weglänge zwischen zwei Stößen ausrechnen und erhält Werte im Bereich **< 1 nm**. Warum folgt daraus zwingend, dass Elektronen *nicht* als klassische Teilchen behandelt werden dürfen? Was darf man dann insbesondere *nicht* mehr machen?
- Sind Elektronen *Fermionen* oder *Bosonen*? Wie sind diese zwei Sorten definiert? Worin besteht der fundamentale Unterschied in ihrem Verhalten, insbesondere bei der Besetzung von Zuständen?

Schnelle Fragen zu 8.1.3: Die elektrische Leitfähigkeit – jetzt aber richtig

- Was zeigt das Bild unten? Erläutere insbesondere die mit der "Lupe" sichtbar gemachte Kurve und die Bedeutung des Farbverlaufs.



- Zeichne ins untere Bild die Kurve der Zustandsdichte und markiere für die gegebene Fermiverteilung besetzte Plätze (mit Farbe). Wieviele Teilchen sind zu verteilen? Wo liegt die Fermienergie? Wie sähe da Bild für dieselbe Teilchenzahl bei **0 K** aus?



- Was sind die wesentlichen Eigenschaften der Femiverteilung?
- Warum können Elektronen, die Zustände bei Energie besetzt haben für die **f(E) = 1** gilt, *nicht* an der Leitung von elektrischem Strom durchs Material partizipieren? Warum können das nur Elektronen im "Aufweichungsbereich"? Wie groß ist der "Aufweichungsbereich" etwa als Funktion der Temperatur?

Übung 8.3-1

Schnelle Fragen zu

8.3 Bändermodell und Materialeigenschaften

Schnelle Fragen zu 8.3.1: Was es so geben kann

- Definiere ganz allgemein Valenz- und Leitungsband.
- Warum sind Bänder unterhalb des Valenzbandes und oberhalb des Leitungsbandes uninteressant?
- Definiere mit Bandschemata: Leiter, Halbleiter und Isolatoren für Raumtemperatur. Was für Überraschungen könnte man mit (bei **RT** nicht so guten) Leitern bei sehr tiefen Temperaturen erleben?

Schnelle Fragen zu 8.3.2: Was wir lernen müssen

Erst mal ein paar Fragen zu "alten" Sachen:

- Was ist ein *Zustand* (aus der Sicht von Atomen, Kristallen, Elektronen,...)
- Was definiert einen *Zustand* und wie kommt man zu seiner quantitativen Festlegung?
  Hinweis : Wieviele Lösungen hat die Schrödingergleichung typischerweise und wie unterscheidet man sie?
- Wie hängen (Gesamt)energien und Zustände zusammen?
- Was ist richtig: Ein Zustand kann viele Energien haben, oder eine Energie kann zu vielen Zustände gehören?
- Was ist eine Zustandsdichte $D(E)$?
- Was wissen wir über die *Besetzung* eines Zustandes mit Elektronen?
- Schreibe, unter Verwendung der *Zustandsdichte* $D(E)$ und *Fermiverteilung* $f(E; E_F, T)$ die allgemeinen Formeln für.
  - Volumendichte der Zustände zwischen E und $E + dE$.
  - Volumendichte der Elektronen zwischen E und $E + dE$.
  - Volumendichte der Elektronen zwischen E_1 und E_2.
  - Zahl der Elektronen zwischen E_1 und E_2
  - Gesamtenergie der Elektronen zwischen E_1 und E_2.
  - Volumendichte der nicht besetzten Zustände zwischen E_1 und E_2
- Schreibe, unter Verwendung der *effektiven Zustandsdichte* N_{eff} und der *Boltzmann-Näherung* für die Fermiverteilung die ungefähren Formeln für:
  - Ladungsträgerdichte im Leitungsband (welche Sorte?).
  - Ladungsträgerdichte im Valenzband (welche Sorte?).
  - Ladungsträgerdichte im Valenzband (mit ($E_F - E_V$ in der Gleichung).
- Wann liegt eine *intrinsische* Ladungsträgerdichte vor und wie lautet die Formel dazu?
- Wo kann die Fermienergie bei intrinsischen Halbleitern nur liegen? Warum? Ableitung / Formel?
- Welche Parameter bestimmen die elektronischen Eigenschaften von intrinsischen und technischen Halbleitern, und welche davon sind Materialkonstanten, technisch einstellbare Größen und ggf. Ärgernisse?

Schnelle Fragen zu 8.3.3: Zustandsdichte, Fermiverteilung, effektive Zustandsdichte und Boltzmann-Näherung

- Das Valenzband liegt bei der Energie E_V ; das Leitungsband hat die Energie E_L. Die Energie exakt in der Mitte der Bandlücke hat die Energie *???*. Wie wäre das, wenn die Energieachse abwärts zeigen würde. also zum Beispiel $E_L = -5$ **eV** und $E_V = -6$ **eV** vorliegen würde?
- Schreibe in der Boltzmann-Näherung die Formel für die intrisische Ladungsträgerdichte auf – unter expliziter Verwendiung der dazu notwendigen Lage der Fermienergie.
- Schreibe in der Boltzmann-Näherung die beiden Formeln für die Ladungsträgerdichte im Leitungs- und Valenzband, und leite daraus das Massenwirkungsgesetz her.
-
-

Lösung zur Übung 8.1-1

Bestimme typische Zahlenwerte für die Beweglichkeit

1. Errechne einige typische Werte für die Beweglichkeit **μ** für Metalle

- Wir expandieren zuerst die Tabelle imdem wir die Dichte der Atome pro **m³** ausrechnen. Das sollte in etwa auch die Elektronendichte ergeben, da von jedem Atom so in etwa ein Elektron ins freie "Elektronengas" geht. Mal sehen ob das zu den angegebenen Zahlen paßt:

Material	ρ [Ω cm]	σ [Ω^{-1} cm^{-1}]	**Density** $d \times 10^3$ [kg m^{-3}]	**Atomic weight** $w \times$ 1u = 1,66 · 10^{-27} kg]	$n_A = d/w$ [m^{-3}]	n_e [m^{-3}]
Silver Ag	$1{,}6 \cdot 10^{-6}$	$6.2 \cdot 10^5$	10,49	107,9	$5{,}85 \cdot 10^{28}$	$\approx 10^{29}$
Copper Cu	$1{,}7 \cdot 10^{-6}$	$5.9 \cdot 10^5$	8,92	63,5	$8{,}46 \cdot 10^{28}$	$\approx 10^{29}$
Lead Pb	$21 \cdot 10^{-6}$	$4.8 \cdot 10^4$	11,34	207,2	$3{,}3 \cdot 10^{28}$	

- Paßt! Das heißt, für typische Metalle kennen wir dieGrößenordnung der Elektronendichte.

Zur Berechnung der Beweglickeit **μ** verwenden wir unsere "Mastergleichung"

$$\mu = \frac{\sigma}{q \cdot n}$$

Mit q = Elementarladung **= 1,60 10^{-19} C** erhalten wir dann, z. B. für Silber

$$\mu_{Ag} = \frac{6{,}2 \cdot 10^5}{1{,}6 \cdot 10^{-19} \cdot 5{,}85 \cdot 10^{28}} \frac{m^3}{C \cdot \Omega \cdot cm} = 66{,}2 \frac{cm^2}{C \cdot \Omega}$$

Die Einheit ist noch etwas daneben, aber mit **[C] = [A · s]** und **[Ω] = [V/A]**, erhalten wir

$$\mu_{Ag} = 66{,}2 \frac{cm^2}{Vs}$$

$$\mu_{Cu} = 43.6 \frac{cm^2}{Vs}$$

$$\mu_{Pb} = 9{,}1 \frac{cm^2}{Vs}$$

2. Betrachte dann typische Feldstärken für Metalle (einfach passende Stromdichten wählen) und berechne daraus die Größenordnung für die Driftgeschwindigkeiten $\mathbf{v_D}$.

- Die Definition der Beweglichkeit war

$$\mu = \frac{v_D}{E}$$

oder

$$v_D = \mu \cdot E$$

Was sind nun typische Feldstärken in Metallen?

- Einfach. Wir betrachten einen Würfel mit l **= 1 cm**. Sein ohmscher Widerstand R ist gegeben durch

$$R = \frac{\rho \cdot l}{F} = \rho \quad [\Omega]$$

- Ein **Cu** or **Ag** Würfel hätte damit einen Widerstand um $1{,}5 \cdot 10^{-6}\ \Omega$. Mit einer Spannung von **1 V**, und damit einer Feldstärke von **1 V/cm** produzieren wir einen Strom von $I = U/R \approx 650\,000$ **A** und damit eine Stromdichte von $j = 650\,000\ \mathrm{A/cm^2}$.
- Das scheint eine recht hohe Stromdichte zu sein. Ja schon, aber in integrierten Schaltungen kommt man trotz kleiner absoluter Ströme gerne mal in die Näher derartig hoher Stromdichten.
- Trotzdem, normale Leitungsdrähte werden eher mit weniger als ca. **3 000 A/cm²** belastet, und das bekommen wir schon für $U = 1{,}5 \cdot 10^{-6}\ \Omega \cdot 3000\ \mathrm{A} = 4{,}5\ \mathrm{mV}$.
- Für eine Größenordnungsabschätzung nehmen wir also mal eine maximale Feldstärke von **5 mV/cm** und eine Beweglichkeit von **50 cm²/Vs** . Damit erhalten wir

$$v_D = 50 \cdot 5\ \frac{\mathrm{mV \cdot cm^2}}{\mathrm{cm \cdot V \cdot s}} = 0{,}25\ \frac{\mathrm{cm}}{\mathrm{s}} = 2{,}5\ \frac{\mathrm{mm}}{\mathrm{s}}$$

Das ist wohl schon eine Überraschung! Die Elektronen müssen sich nur g a n z l a n g s a m durch den Draht bewegen um einen riesigen Strom fliessen zu lassen!

- Stimmt das überhaupt - oder haben wir was falsch gemacht?
- Haben wir nicht. Es stimmt soweit wir das ganze klassisch betrachten! Quantenmechanisch wird es übrigens noch schlimmer; siehe später. Und nicht vergessen: Die Driftgeschwindigkeit ist nur eine winzige Änderung an den sehr großen thermischen Geschwindigkeiten!
- Es ist wie bei einem Fliegenschwarm, der manchmal im Sommer wie eineWolke in der Luft hängt. Die einzelnen Fliegen sausen wie wahnsinnig mit hoher Geschwindigkeit wild durcheinander. Der ganze Schwarm bewegt sich aber kaum, oder nur mit kleiner Driftgeschwindigkeit falls ein Wind als treibende Kraft auftritt.

Lösung zur Übung 8.1-2

Berechne Zahlen für v_0, v_D, τ, und l der freien Elektronen

1. Aufgabe: Berechne die mittlere thermische Geschwindigkeit v_0 (T) *klassischer* Elektronen.

- Einfach. Einsetzen in die gegebene Formel ergibt:

$$v_0 = \left(\frac{3k_BT}{m}\right)^{1/2} = \left(\frac{3 \cdot 8{,}6\ 10^{-5} \cdot 300}{9{,}1 \cdot 10^{-31}}\ \frac{eV \cdot K}{K \cdot kg}\right)^{1/2} = 2{,}92 \cdot 10^{14} \cdot \left(\frac{eV}{kg}\right)^{1/2}$$

- Die Einheit "Wurzel aus **eV/kg**" für die Geschwindigkeit ist ein bißchen daneben. Wir haben die "mechanischen" **1 kg · m²/s² = 1 J** mit $k_B\ T$ in **eV** ("atomar") gemessen gemischt; wir müssen also **eV** zu **J** konvertieren (benutze den Link). Wir haben **1 eV = 1,6 · 10⁻¹⁹ J = 1,6 · 10⁻¹⁹ kg · m² · s⁻²** und erhalten:

$$v_0 = 2{,}92 \cdot 10^{14} \cdot \left(\frac{1{,}6 \cdot 10^{-19}\ kg \cdot m^2}{kg \cdot s^2}\right)^{1/2} = 1{,}17 \cdot 10^5\ m/s = \mathbf{4{,}2 \cdot 10^5\ km/h}$$

Das ist wohl etwas überraschend. Unsere Elektronen sind nicht langsam. Wir haben einenWert im Bereich**km/s** , wie schon mal behauptet.

- Andererseits: Für $T \to 0$ würde $v_0 \to 0$ gehen – und das sollte uns zu denken geben!

2. Aufgabe: Berechne die mittlere Stoßzeit τ der Elektronen.

- Die passende Formel ist:

$$\tau = \frac{\sigma \cdot m}{n \cdot e^2}$$

Zunächst brauchen wir Zahlen für die Konzentration n der Elektronen pro **m³**. Dafür vervollständigen wir die gegebene Tabelle. *(Achtung! jetzt immer m statt cm!)* Für die Zahl der Atome = Zahl der Elektronen pro **m³** müssen wir die Dichte durchs Atomgewicht teilen:

Atom	Dichte [kg · m⁻³]	Atomgewicht [1,66 · 10⁻²⁷ kg]	spezif. Leitfähigk. σ [10⁷ Ω⁻¹ · m⁻¹]	atomare Konzentration [10²⁸ m⁻³]
Na	970	23	2,4	2,54
Cu	8.920	64	5,9	8,40
Au	19.300	197	4,5	5,90

- Wir nehmen **5 · 10²⁸ m⁻³** als eine gute Größenordnung für n und einen Wert **σ = 5 · 10⁷ Ω⁻¹ m⁻¹** als eine mittlere Leitfähigkeit. Wir erhalten:

$$\tau = \frac{5 \cdot 10^7 \cdot 9{,}1 \cdot 10^{-31}}{5 \cdot 10^{28} \cdot (1{,}6 \cdot 10^{-19})^2}\ \frac{kg \cdot m^3}{\Omega \cdot m \cdot A^2 \cdot s^2} = 3{,}55 \cdot 10^{-14}\ \frac{kg \cdot m^2}{V \cdot A \cdot s^2}$$

In Sekunden **[s]** würde es besser aussehen. Also wieder Einheiten umrechnen!

- Leicht: *Volt* mal *Ampere* = *Watt* = *Leistung* = *Energie pro Zeit* mit der Einheit **1 J · s⁻¹ = 1 kg · m² · s⁻³**. Einsetzen gibt:

$$\tau = 3{,}55 \cdot 10^{-14} \frac{\text{kg} \cdot \text{m}^2 \cdot \text{s}^3}{\text{kg} \cdot \text{m}^2 \cdot \text{s}^2} = 3{,}55 \cdot 10^{-14}\ \text{s} = 36\ \text{fs}$$

Das sind recht kurze Zeiten. Für ein klassisches Teilchen viel zu kurz – sagen die Lehrbücher. Aber woher sollen *wir* wissen, was angemessen wäre? Schauen wir mal weiter, dann wird's klarer.

3. Aufgabe: Berechne die oberer Grenze für eine Driftgeschwindigkeit $\mathbf{v_D}$ der Elektronen – indem wir eine sehr hohe Feldstärke von $\boldsymbol{E}$ **= 100 V/m = 1 V/cm** nehmen.

- Einsetzen in die Gleichung mit den jetzt geläufigen Umrechnungen der Maßeinheiten gibt:

$$v_D = \frac{E \cdot e \cdot \tau}{m} = \frac{100 \cdot 1{,}6 \cdot 10^{-19} \cdot 3{,}55 \cdot 10^{-14}}{9{,}1 \cdot 10^{-31}} \frac{\text{V} \cdot \text{C} \cdot \text{s}}{\text{m} \cdot \text{kg}} = 6{,}24 \cdot 10^{-1} \frac{\text{V} \cdot \text{A} \cdot \text{s}^2}{\text{m} \cdot \text{kg}}$$

$$v_D = 6{,}24 \cdot 10^{-1} \frac{\text{kg} \cdot \text{m}^2 \cdot \text{s}^2}{\text{m} \cdot \text{kg} \cdot \text{s}^3} = 6{,}24 \cdot 10^{-1}\ \text{m/s} = 624\ \text{mm/s}$$

Das ist so ungefähr das Höchste der Gefühle, aber verglichen mit der thermischen Geschwindigkeit fast nichts!

- Man solte sich klarmachen, dass eine Feldstärke von **1 V/cm** in einem Metall gigantisch groß ist. Wir rechnen mal schnell die zugehörige Stromdichte $\boldsymbol{j}$ aus:
- Wir haben $j = \sigma \cdot E = 5 \cdot 10^7\ \Omega^{-1}\ \text{m}^{-1} \cdot 100\ \text{V/m} = 5 \cdot 10^9\ \text{A/m}^2 = 5 \cdot 10^5\ \text{A/cm}^2$!
- Für eine praktikablere Stromdichte von, sagen wir, $5 \cdot 10^3\ \text{A/cm}^2$ müssen wir die Feldstärke hundertfach reduzieren und erhalten gerade noch $\mathbf{v_D}$ **= 6,24 mm/s**.

4. Aufgabe: Berechne die mittlere freie Weglänge $\boldsymbol{l}$.

- Die Formel ist einfach (und $\mathbf{v_D}$ können wir in der Tat getrost vergessen):

$$l = v_0 \cdot \tau = 1{,}17 \cdot 10^5 \cdot 3{,}55 \cdot 10^{-14}\ \text{m} = 4{,}2 \cdot 10^{-9}\ \text{m} = 4{,}2\ \text{nm}$$

Das ist Unsinn!

- Die Elektronen können sich nicht auf Distanzen, die nicht viel größer als ein Atom sind, mit Defekten etc. stoßen! Die mittlere freie Weglänge sollte deutlich größer sein als errechnet.

Was haben wir falsch gemacht? Hier steht's!

- Elektronen können nicht alle bei $T \to 0$ **K** beliebig langsam werden und dann alle denselben Zustand besetzen. Ein Teil *muss* wg. des **Pauli-Prinzips** auf höheren Zuständen = bei höheren Energien sitzen, d. h. höhere Geschwindigkeiten besitzen – bei jeder vernünftigen Temperatur. Im Endeffekt sind unsere Elektronen deshalb noch *viel schneller* als hier *klassisch* ausgerechnet.
- Sind sie viel schneller, wird die mittlere freie Weglänge größer ⇒ Also: Don't worry, be happy; die Quantentheorie bekommt's hin!

Lösung zur Übung 8.3-1

Ladungsträgerdichten im Leitungsband von Halbleitern

1.

2.

Lösung zur Übung 8.3-2

Massenwirkungsgesetz

1.

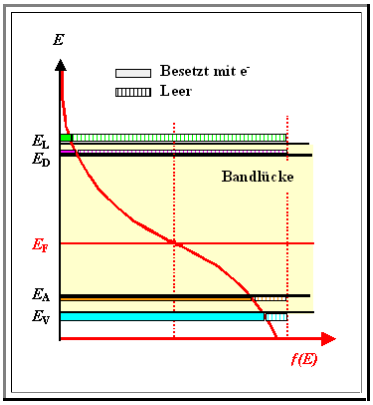
2.

Advanced

Quantitative Berechnung der Fermienergie bei dotierten Halbleitern

Wo liegt die Fermienenergie ?

- Wir lassen beliebige Konzentrationen an Akzeptoren und Donatoren zu; betrachten aber nur *zwei* zusätzliche Niveaus in der Bandlücke bei E_D und E_A
  - Die zugehörigen Zustandsdichten sind identisch mit den Konzentrationen der Dotieratome, d.h. wir haben N_D und N_A Plätze für Elektronen bei den zugehörigen Energien.
  - Wir zeichnen das alles einfach mal in ein Banddiagramm und schauen uns an, wieviele der angebotenen Plätze besetzt sind bei einer Fermiverteilung mit zunächst noch willkürlich gewählter Fermienergie. Das ist jetzt einfach zu machen und schaut so aus:



  - Die farbigen Balken symbolisieren (von oben nach unten) die Zustandsdichten

N_{eff}^{L}	bei	E_L
N_D	bei	E_D
N_A	bei	E_A
N_{eff}^{V}	bei	E_V

- Was wir *jetzt* zu beachten haben, um die Fermienergie bestimmen zu können, ist **Elektroneutralität** - nur mit der Gleichsetzung zweier Konzentrationen wie bisher kommt man nicht weiter.
  - Was für Ladungen haben wir zu beachten? Wo hat sich etwas geändert (immer im Vergleich zu $T = 0K$)?
  - Schauen wir uns also die Bilanz an, getrennt nach negativen und positiven Ladungen. Wir schreiben das Ganze in fast voller Allgemeinheit mit der Fermiverteilung für die Dotierniveaus, und den effektiven Zustandsdichten und der Boltzmann-Näherung für die Bänder um die unhandliche Integrale zu vermeiden.

Negativ		Positiv	
Art	Formel	Art	Formel
Elektronen in L	$n_L = N_{eff}^{L} \cdot \exp-(E_L - E_F)/kT$	Löcher in V	$n_V = N_{eff}^{V} \cdot \exp-(E_F - E_V)/kT$
negativ ionisierte Akzeptoren	$N^{-}_A = N_A^{L} \cdot f(E_A, E_F, T)$	positiv ionisierte Donatoren	$N^{+}_D = N_D \cdot \{1 - f(E_D, E_F, T)\}$

  - Alles was wir nun zu tun haben, ist Ladungsneutralität in der Form Σ neg. Ladungen = Σ pos. Ladungen aufzuschreiben, d.h. folgende Gleichung:

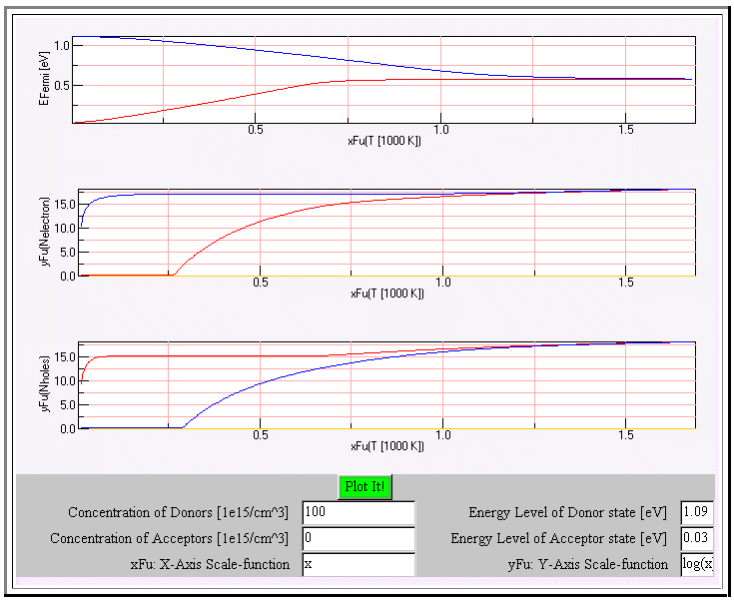
$$N_{eff}^{L} \cdot \exp-(E_L - E_F)/kT + N_A \cdot f(E_A, E_F, T) = N_{eff}^{V} \cdot \{1 - f(E_V, E_F, T_V)\} + N_D \cdot \exp-(E_F - E_V)/kT$$

- Voilá - *eine* Gleichung für die *eine* Unbekannte E_F - das hatten wir schon mal. Wir müssen nur nach E_F auflösen - fertig!
  - Ob man diese Gleichung wohl *analytisch* lösen kann? Nun - vergiß es!

- Es geht nicht; und wir müssen nun zu Fallunterscheidungen und Näherungen Zuflucht nehmen - oder zum ***PC***, den wir ja zur Betrachtung dieses Hyperskripts schon haben.

Denn die *numerische* Lösung der obigen Gleichung für beliebige Parameter ist kein großes Problem; wir können die Fermienergie jetzt also *immer* ausrechnen.

- Und wenn wir die Fermienergie haben, können wir sie benutzen um (ebenfalls numerisch) *alle* gewünschten Konzentrationen als Funktion *aller* vorgegebenen Parameter auszurechnen.
- Das tun wir mal - in einem eigenen Modul mit einem entsprechenden JAVA Applet, das die Numerik für uns übernimmt. Was man erhält sieht beispielsweise so aus:



- Gezeigt ist:

  - Die *Fermienergie* als Funktion der Temperatur (obere Kurve)
  - Der log der *Konzentration von Elektronen* im Leitungsband als Funktion der Temperatur (mittlere Kurve).
  - Der log der *Konzentration von Löchern* im Valenzband als Funktion der Temperatur (untere Kurve)

  für eine Konzentration an Akzeptoren von $\mathbf{10^{15}\ cm^{-3}}$ mit den roten Linien, und für eine Konzentration an Donatoren von $\mathbf{10^{17}\ cm^{-3}}$ mit den blauen Linien.

Eigentlich ist damit alles gesagt. Da wir uns aber für *prinzipielle* Betrachtungen mit analytischen Formeln viel leichter tun als mit der Numerik, wird sich das nächste Unterkapitel mit einigen sehr nützlichen analytischen Formeln für die Ladungsträgerkonzentrationen beschäftigen.

Beweglichkeit von Ladungsträgern

Advanced

Bereits bekannte Eigenschaften der Beweglichkeit

- In diesem Modul wollen wir kurz wiederholen und kommentieren, was wir über die Beweglichkeit schon gelernt haben, und dann eine weitere, sehr wichtige Beziehung ableiten
- Kennengelernt haben wir die Beweglichkeit **μ** als die Proportionalitätskonstante zwischen Driftgeschwindigkeit $\mathbf{v_D}$ und elektrischem Feld ***E***; es gilt

$$\mathbf{v_D} = \mu \cdot E$$

  - Gilt dies universell? Kann man mit "beliebig" hohen Feldern beliebig hohe Driftgeschwindigkeiten realisieren?
  - Kann man natürlich nicht. Bei sehr hohen Feldern "knallt "entweder das Material durch, oder aber die Driftgeschwindigkeit sättigt schon vorher, d.h sie nimmt erst nicht mehr linear zu, schließlich gar nicht mehr, wenn die Feldstärke weiterhin erhöht wird.
  - Die "Sättigungsbeweglichkeit" kann ein wichtiger Materialparameter sein, sobald man Hochleistungsanwendungen im Auge hat. Hier hat z.B. **SiC** große Vorteile im Vergleich zu anderen Halbleitern.
- Damit war dann schon klar, dass die Beweglichkeit neben der Ladungsträgerkonzentration ***n*** (und natürlich der Ladung ***q***), der zweite für die spezifische Leitfähigkeit σ verantwortliche Materialparameter ist. Wir hatten die Grundformel:

$$\sigma = q \cdot n \cdot \mu$$

- Danach haben wir noch tiefer auf die Bewegung der Ladungsträger mit Masse ***m*** geschaut, und uns klar gemacht, dass die Beweglichkeit unmittelbar mit mittleren freien Weglängen ***l*** und Stoßzeiten τ zu tun hat .
  - Dabei war dann die mittlere Geschwindigkeit $\mathbf{v_0}$ der Ladungsträger wichtiger als die Driftgeschwindigkeit $\mathbf{v_D}$, da praktisch immer gilt $\mathbf{v_0 >> v_D}$. Wir hatten

$$\mu = \frac{e \cdot \tau}{m}$$

$$\mu \approx \frac{e \cdot l}{2 \cdot m \cdot v_0}$$

- Physikalische Größen sind immer nur so gut wie ihre Meßbarkeit. Erfreulicherweise ist aber **μ** gut meßbar durch den Hall-Effekt; im Link erklärt.
  - Eigentlich mißt der Hall-Effekt primär die Ladungsträgerkonzentration ***n***. Zusammen mit dem leicht meßbaren σ bekommt man dann aber sofort auch **μ**.
- Die Beweglichkeit kontrolliert also zusammen mit der *Ladungsträgerkonzentration* die *Leitfähigkeit* und damit eine der wichtigsten technischen Materialeigenschaften
  - Sie verbindet dabei Gefügeeigenschaften ("Defekte") mit den elektronischen Eigenschaften, ist also keine Material*konstante* , die durch das Gefüge nur schwach beeinflußt wird (wie z.B. der Schmelzpunkt oder der Elastizitätsmodul), sondern kann empfindlich von Strukturen abhängen.
  - Das hat Vor- und Nachteile: Einerseits wird man abhängig von z.B. der Materialvorgeschichte, andererseits kann man *designen*, d.h. gezielt ändern.
- Die vielleicht wichtigste Beziehung zwischen der Beweglichkeit und anderen Materialparametern haben wir aber bisher nur postuliert; es ist:
  - Die **Einstein-Smoluchowski Beziehung**; sie koppelt die Beweglichkeit ***μ*** eines herumvagabundierenden Teilchens mit seinem Diffusionskoeffizienten ***D***.
  - Die *Einstein-Smoluchowski Beziehung* lautete

$$D = \frac{kT}{e} \cdot \mu$$

- Wir wollen sie im folgenden kurz herleiten.

Herleitung der Einstein-Smoluchowski Beziehung

- Wir betrachten ganz allgemein die *Stromdichte* in einem homogenen Material, das aber einen Gradienten der Teilchenkonzentration ***n*** haben soll, und in dem die Teilchen diffundieren, d.h. sich "stochastisch" bewegen.
  - Dann gilt erstmal das 1. Ficksche Gesetz. Es sagt uns, dass die *Teilchen* stromdichte j^{T}_{diff} (noch nicht die elektrisch Stromdichte) von *diffundierenden* Teilchen gegeben ist durch

$$j^{T}_{diff} = -D \cdot \nabla n$$

  - ***D*** ist der (i.d.R. stark temperaturabhängige) **Diffusionskoeffizient** der betrachteten Teilchensorte.
- Soweit ist alles klar. Jetzt machen wir aber den nächsten Schritt und betrachten Teichen, die eine elektrische Ladung tragen.
  - Der Teilchenstrom j^{T}_{diff} ist dann gleichzeitig auch ein **elektrischer Diffusionstrom** j^{El}_{diff}; er ist gegeben durch

$$j^{El}_{diff} = -q \cdot j^{T}_{diff} = -q \cdot D \cdot \nabla n$$

- Das schauen wir uns aus Gründen der Einfachheit jetzt nur noch *ein*dimensional in ***x***-Richtung für ein Elektron mit Elementarladung (i.e. $q = -e$) an, wir haben also

$$j^{El}_{diff}(x) = e \cdot D \cdot \frac{dn(x)}{dx}$$

- Jetzt haben wir aber ein Problem: In einem Material, das nur so rumliegt, kann es auf Dauer keinen elektrischen (*Netto*)strom geben; auch nicht wenn aus irgendwelchen Gründen ein Ladungsträgergradient vorhanden ist.
  - Ein Stück **Si**, z.B., das einen Dotierstoffgradienten hat, ist zwar (so gut wie) homogen, aber hat dann auch einen Ladungsträgergradienten. Es kann aber offenbar nicht dauernd ein Strom fließen.
  - Was geschieht? Einfach: Der urprünglich fließende Strom ändert die Verteilung der Ladungen und produziert dadurch ein elektrisches Feld $E(x)$ (das wir lila schreiben, um Verwechslungen mit der Energie ***E*** auszuschließen), das die Ladungen wieder zurücktreibt.
- Den durch ein elektrisches Feld verursachten **Feldstrom** j_{field} kennen wir aber, er ist immer gegeben durch

$$j_{field} = \sigma \cdot E(x) = e \cdot n(x) \cdot \mu \cdot E(x)$$

- Der gesamte Strom j_{total} ist die Summe dieser beiden Teilströme, er muß **= 0** sein. Wir haben

$$j_{total}(x) = e \cdot n(x) \cdot \mu \cdot E(x) - e \cdot D \cdot \frac{dn(x)}{dx} = 0$$

- Anders geschrieben, müssen die beiden Teilströme entgegengesetzt gleich groß sein, oder

$$e \cdot n(x) \cdot \mu \cdot E(x) = -D^{e} \cdot \frac{dn(x)}{dx}$$

- Soweit, so gut - aber jetzt sitzen wir fest. Um weiter zu kommen, d.h. eine Beziehung zwischen ***D*** und **μ** zu finden, brauchen wir eine weitere Beziehung.
  - Da wir Gleichgewicht betrachten, nehmen wir die Boltzmannverteilung (im Zweifel als Näherung an die Fermiverteilung) um etwas über die *Teilchendichte* bei verschiedenen Energien aussagen zu können. Aber wie?
  - Einfach: Wir betrachten statt dem elektrischen Feld die zugehörige *elektrostatische Energie* oder das elektrostatische Potential ***V*(*x*)**. Es ist mit dem Feld über folgende Beziehung verknüpft:

$$E(x) = -\frac{\mathrm{d}V(x)}{\mathrm{d}x}$$

- Die zugehörige elektrostatische Energie der Teilchen ist **e · *V*(*x*)**; und die Verteilung auf diese Energien regelt die Boltzmannstatistik, d.h. wir haben

$$n(x) = n_0 \cdot \exp\frac{\mathrm{e} \cdot V(x)}{\mathrm{k}T}$$

- Da wir den Gradienten der Konzentration brauchen, differenzieren wir einmal und erhalten

$$\frac{\mathrm{d}n}{\mathrm{d}x} = n_0 \cdot (\mathrm{e}/\mathrm{k}T) \cdot \frac{\mathrm{d}V(x)}{\mathrm{d}x} \cdot \exp\frac{\mathrm{e}V(x)}{\mathrm{k}T}$$

$$\frac{\mathrm{d}n}{\mathrm{d}x} = n(x) \cdot (\mathrm{e}/\mathrm{k}T) \cdot \frac{\mathrm{d}V(x)}{\mathrm{d}x}$$

  - Das Ergebnis setzen wir in unsere Strombilanz von oben ein und erhalten

$$\mu \cdot n(x) \cdot \frac{\mathrm{d}V(x)}{\mathrm{d}x} = D \cdot (\mathrm{e}/\mathrm{k}T) \cdot n(x) \cdot \frac{\mathrm{d}V(x)}{\mathrm{d}x}$$

- Siehe da, die Konzentration und der Gradient kürzt sich raus, es bleibt

$$D = \frac{\mu \cdot \mathrm{k}T}{\mathrm{e}}$$

- Das ist die *Einstein-Smoluchowski Beziehung*!
  - In Worten sagt sie: Gleichgewicht zwischen einem durch einen Konzentrationsgradienten getriebenen Diffusionstrom und und einem Feldstrom erfordert, dass Diffusionskoeffizient und Beweglichkeit keine unabhängigen Größen sind, sondern durch die gefundene Beziehung gekoppelt sein müssen.

Übung 9.1-1 Fermienergie in intrinsischen Halbleitern und Massenwirkungsgesetz

Für die Ladungsträgerdichten haben wir die zwei (linken) Grundgleichungen:

$n_e \approx N_{eff} \cdot \exp - \frac{E_L - E_F}{kT}$ $n_h \approx N_{eff} \cdot \exp - \frac{E_F - E_V}{kT}$	$n_e \approx N_{eff} \cdot f(E_L ; E_F, T)$ $n_h \approx N_{eff} \cdot \{1 - f(E_V ; E_F, T)\}$ Präzisere Version; kann man nehmen um Rechnen mit Exponentialfunktionen zu üben

Außerdem wissen wir, dass für *intrinsische* Halbleiter $n_e = n_h = n_i$ gelten muss. Damit zu den Fragen:

1. Zeige, dass für intrinsische Halbleiter die nachfolgende Gleichung gelten muss. Zeichne ein Banddiagramm mit dieser Fermienergie und einer passenden qualitativen Kurve der Fermiverteilung. Diskutiere, warum man das Ergebnis auch rein graphisch hätte erhalten können.

$$E_F = \frac{E_L + E_V}{2}$$

Für Experten:
1.1 Was ändert sich, wenn die beiden effektiven Zustandsdichten verschieden groß sind, d. h. wir haben N^L_{eff} und N^V_{eff} ?
1.2 Bekommt man *ohne* die Boltzmann-Näherung dasselbe Ergebnis (d.h. mit den Gleichungen oben rechts)?

2. Leite das Massenwirkungsgesetz her. Gilt es nur für intrinsische Halbleiter? Was folgt für die Fermienergie, falls z.B. $n_e >> n_h$?

Solution

Übung 9.1-2

Bestimme die Ladungsträgerdichte als Funktion der Temperatur bei dotierten Halbleitern

1. Formuliere die Gleichung für die Ladungsträgerdichte im Leitungsband für ein Donatorniveau bei E_D das **0,05 eV** unterhalb des Leitungsbandes bei E_L sitzt für tiefe Temperaturen. N_{eff} kann man 10^{19} **cm**$^{-3}$ verwenden.
Hinweis Überlege, wo die Fermienergie bei sehr tiefen Temperareun liegen muss und bestimm darsu die Energiebarriere, die in den Boltzmannfaktor eingeht.

- Zeichne diese Gleichung als Kurve in ein Arrheniusdiagramm ein, das den Temperaturbereich **300 K - 30 K** überspannt und den Konzentrationsbereich **?** - ca. 10^{20} **cm**$^{-3}$.

2.Nehme an, dass bei allen T immer *alle* $N_{Don} = 10^{16}$ **cm**$^{-3}$ Donatoren ihr Elektron ins Leitungsband "geschickt" haben.

- Zeichne die aus dieser (nicht richtigen) Annahmen folgende Ladungsträgerdichte im Leitungsbandin in dasselbe Diagramm für den gesamten Temperaturbereich ein.

3. Formuliere die Gleichung für die Ladungsträgerdichte im Leitungsband von *Silizium* für den Fall, dass die Elektronen *alle* aus dem Valenzband kommen.
Hinweis Überlege, wo die Fermienergie in diesem Fall liegen muss, erinnere (oder schau nach) wie groß die Bandlücke von Si ist, und bestimme daraus die Energiebarriere, die in den Boltzmannfaktor eingeht.

- Zeichne diese Gleichung als Kurve in dasselbe Arrheniusdiagramm ein wie die beiden obigen Kurven

4. "Errate" aus den drei Kurven wie die wirkliche Kurve aussieht und diskutiere warum.

Lösung

Übung 9.1-1

Schnelle Fragen zu

9.1 Ladungsträgerdichte und Leitfähigkeit

Schnelle Fragen zu 9.1.1: Elektronen, Löcher und intrinsische Ladungsträgerdichte

- Beschreibe Elektronen und Löcher im Leitungs- bzw. Valenzband im Ortsraum. Verwende eine schematische Darsellung des **Si**-Kristalls, das die **4** kovalenten Bindungen eines **Si** Atoms zeigt mit den zwei Elektronen pro Bindung.
- Warum sind Elektronen im Valenzband nicht beweglich, die Löcher aber schon? Hätte man die Unbeweglichkeit der Elektronen im Valenzband auch schon bei den oft verwendeten Potentialdarstellungen wie im Link sehen können, und falls ja, warum?
- Schreibe die ganz allgemeine Gleichung für die Gesamtdichte der Elektronen im Leitungsband eines Halbleiters mit Zustandsdichte $D_L(E)$ und Fermienergie E_F gefolgt von sinnvollen Näherungen.
- Erläutere das Konzept der Löcher und warum sie wie positiv geladene Elektronen behandelt werden können. Diskutiere (in Formeln wo sinnvoll)
  - Konzentration.
  - Besetzung von Zuständen.
  - Beweglichkeit.
  - Beitrag zur Leitfähigkeit.
  - Vorzeichen.
  - Wie Stromfluss durch Löcher in einem Halbleiter zu Stromfluss durch Elekronen im Metall-Anschlussdraht paßt.
- Zeige, dass folgender Zusammenhang gilt, und dass daraus die Endgleichung für die Löcherdichte im Rückgrat folgt:

$$1 - f(E_V; E_F\ T) = \frac{1}{1 + \exp\dfrac{E_F - E_V}{kT}} \approx \exp - \frac{E_F - E_V}{kT}$$

- Leite das Massenwirkungsgesetz $n_L \cdot n_V = n_i^{\,2}$ her.
- Zeige mit Formeln, dass für *intrinsische* Halbleiter die Fermienergie in der Mitte der Energielücke liegen *muß* ; d.h. $E_F = (E_L + E_V)/2$. Diskutiere (oder rechne), was passieren würde, falls die effektiven Zustandsdichten im Leitungs- und Valenzband verschieden groß sind.
- Berechne die intrinsische Ladungsträgerdichte in Halbleitern mit effektiver Zustandsdichte (in **V** und **L**) von $N_{eff} = 10^{19}\ cm^{-3}$ und Bandlücken von **0,5 eV**, **1 eV**, **2 eV** und **4 eV**.

Schnelle Fragen zu 9.1.2: Darstellung der Stromleitung im Banddiagramm

- Welche (Teil) Ströme fließen (qualitativ) durch einen beliebigen herausgegriffen Querschnitt eines Stückes **Si**, das bei **RT** im Dunkeln nur so rumliegt. Was ist der Nettostrom?
- Was passier mit der Energie der Elektronen in in einem Material, wenn man es mit einer Spannungsquelle verbindet.
- Zeichne das Banddiagramm eines *Metall* drahtes mit konstantem Querschnitt, bei dem ein Ende auf **–1 V** liegt und das andere auf **0 V** (= Masse). Wie kann man den fließenden Strom graphisch darstellen?
- Zeichne das Banddiagramm eines *Halbeiter* drahtes (*intrinsisch*) mit konstantem Querschnitt, bei dem ein Ende auf **–1 V** liegt und das andere auf **0 V** (= Masse). Wie kann man den fließenden Strom graphisch darstellen?
- Zeichne das Banddiagramm eines *Halbeiter* drahtes (stark ***p**-leitend*) mit konstantem Querschnitt, bei dem ein Ende auf **–1 V** liegt und das andere auf **0 V** (= Masse). Wie kann man den fließenden Strom graphisch darstellen?
- Warum ist eine *Bandverbiegung* immer mit einem *elektrischen Feld* gekoppelt?

- *Schwierige Frage*: Zeichne das Banddiagramm eines Halbleiters, den man zwischen zwei auf Spannung liegenden Kondensatorplatten steckt, die mit einem sehr dünnen Isolator überzogen sind. *Hinwei:s:* Kein Strom = Gleichgewicht = Fermienergie überall dieselbe.

Schnelle Fragen zu 9.1.3: Dotieren und die Fermienergie

- Beschreibe Elektronen und Löcher im Leitungs- bzw. Valenzband im *Ortsraum* für *dotierte* Halbleiter. Verwende eine schematische Darstellung des **Si**-Kristalls, das die **4** kovalenten Bindungen eines **Si** Atoms zeigt mit den zwei Elektronen pro Bindung.
- Wo müssen die Donator- und Akzeptorniveaus in der Bandlücke ungefähr liegen, damit man von "*Dotieren* " reden kann?
- Sortiere nach folgendem Schema nach **n**-Typ Halbleiter und **p**-Typ Halbleiter und ordne zu:
  Akzeptoren, **P** Dotierung, Löcher sind Majoritäten, **p-Si**, **B**, Elektronen sind Minoritäten, Fermienergie in der Nähe des Leitungsbandes, **P-Si**, $N_{Don} >> N_{Akz}$, $n_h >> n_e$.

Parameter	n-Typ	p-Typ
Akzeptoren	x (Kreuz) hier	....oder hier?
P Dotierung		
...		

- Wo muss die Fermienergie aus qualitativ einsichtigen Gründen bei **p**-Typ Halbeitern und rel. tiefen Temperaturen liegen? Skizze und Erläuterung.
- Skizziere für **Si** (Bandlücke = **? eV**) in einem $\log(n_{maj}) - 1/T$ Diagramm (= Arrhenius Diagramm) die quantitativen (dann Aufgabe 9.1-2) oder hier nur qualitativen Kurven für:
  - $n_i = N_{eff} \cdot \exp-(?/kT)$
  - $n_e = N_{Don} \cdot \exp-(?/k\,T)$
  - $n_e = N_{Don}$

  Ein typisches Donatorniveau liegt um **0.05 eV** unterhalb der Leitungsbandkante. Für N_{eff} kann man 10^{19} **cm**$^{-3}$ verwenden. Dotierkonzentrationen liegen tpischerweise im Bereich $(10^{15} - 10^{18})$**cm**$^{-3}$.
- Wie groß ist in *dotiertem* **Si** bei **RT** die Majoritätsladungsträgerkonzentration und die Minoritätsladungsträgerkonzentration in guter Näherung (Formeln!)? Was passiert *qualitativ* bei sehr großen und sehr kleinen Temperaturen?
- Wenn die Ladungsträgerdichte *größer* werden soll als in der einfachen Gleichung
  $n_L(\text{Dot}) = N_{Don} \cdot \exp -E_L - E_{Don} / 2kT$ für Dotieren bei tiefen Temperaturen gegeben, dann muss die Fermienergie - ja was wohl?
- Wie wird **p**-dotiert? Dazu führe man die für **n**-Dotieren gemachten Überlegungen für ein Dotierniveau dicht oberhalb des Leitungsbandes (beim **Si** immer durch **Bor** Dotierung verursacht) durch - mit Skizze und Formeln.
- Bei der Temperatur, bei der die *intrinsische* Ladungsträgerdichte ungefähr den Wert 10^{18} **cm**$^{-18}$ ereicht hat, hat auch der betreffende Halbleiter das Ende seines Arbeitstemperaturbereichs erreicht. Warum? Wo liegt diese Temperatur so ungefähr für die in der Tabelle gezeigten Halbleiter?

Übung 9.2-1

Schnelle Fragen zu

9.2 Vom idealen zum realen Halbleiter

Schnelle Fragen zu 9.2.1: Beweglichkeit und Leitfähigkeit bei dotierten Halbleitern

- Was war nochmal die Beweglichkeit μ und wodurch wird sie bestimmt?
- Was war nochmal "random walk"? Was sind und welche Beziehungen gibt es in diesem Zusammenhang zwischen den Größen: *Diffusionskoeffizient* ***D***, *Schrittweite* ***a***, *Zahl der Schritte* ***N***, *Sprungrate* oder Schrittfrequenz ***r***, *Zeit* τ der Wanderung und *Diffusionslänge* ***L***.
- Welche Grüßen verknüpft die *Einstein-Smoluchowski Beziehung* und warum ist es klar, dass eine sehr direkte Beziehung bestehen muss?
- Wie muss sich Dotierung auf die Beweglichkeit auswirken?
- Was ist die Grundgleichung für die spez. Leitfähigkeit σ und wie wirkt sich Dotierung darauf aus? *Hinweis*: es gibt zwei Effekte, einer überwiegt.
- Warum ist die Leitfähigkeit von **n-Si** und **p-Si** bei exakt gleicher Dotierstoffkonzentration etwas verschieden?

Schnelle Fragen zu 9.2.2: Generation, Rekombination, Lebensdauer und Diffusionslänge

- Zur Zeit leben ca. $\mathbf{8 \cdot 10^9}$ Menschen auf diesem Planeten. Die mittlere Lebenserwartung ist - keine Ahnung - sagen wir **60** Jahre. Wieviele Menschen sterben pro Tag? Pro Sekunde? Wie muss die Geburtenrate sein, damit sich die Bevölkerungsdichte nicht ändert?
- Die mittlere Lebenserwartung eines Minoritätsladungsträgers ist seine Lebensdauer τ. Bei einer Konzentration von n_{Min} ist seine Rekombinationsrate R wie groß? Wieviel Minoritätsladungsträger werden pro Sekunde generiert?
- Ein Stück **p**-dotiertes **Si** ($\Rightarrow n_i \approx 10^{10}\ \mathrm{cm}^{-3}$ mit $N_{\mathrm{Don}} = 10^{17}\ \mathrm{cm}^{-3}$ wird von 10^3 Photonen/s getroffen. Beschreibe zunächst qualitativ was passiert. Um wieviel Prozent ändern sich Majoritäts- und Minoritätskonzentrationen? Wir unterstellen eine (sehr große) Lebensdauer τ von **1 ms**. Wie groß ist die Generationsrate? Wie stark ändert sie sich durch die Beleuchtung?
- Im Gleichgewicht eines Halbleiters werden $G = 10^6\ \mathrm{cm}^{-3}\mathrm{s}^{-1}$ Ladungsträger pro Sekunde generiert. Wie kann man daraus die Konzentration berechnen?
- Wie lautet der Zusammenhang zwischen Lebensdauer und Diffusionslänge?
- Wie groß ist die Energie eines Elektron-Loch Paares vor und nach einer Rekombination? Wie kann der Energieerhaltungssatz bei einer Rekombination befriedigt werden?
- Was versteht man unter direkten und indirekten Halbleitern? Gib Beispiele. Was ist die Bedeutung für die Technik?
- Was bestimmt die Lebensdauer in indirekten Halbleitern?

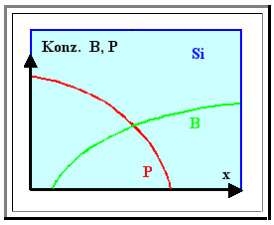
Übung 9.3-1

Schnelle Fragen zu

9.3 Raumladungszonen und Übergänge

Schnelle Fragen zu 9.3.1: Grundsätzliches

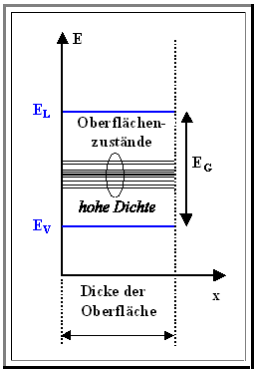
- Das Bild unten zeigt Konzentrationen von Bor (**B**) und Phosphor (**P**)i n einem Stück **Si**. Ist ein **pn**-Übergang vorhanden? Falls, ja, warum und wo? Welche Seite wäre ggf. **n-Si**, welche **p-Si**?



- Wie würde man solche Konzentrationsprofile *machen*?
- Was ist ein *Schottky Kontakt* (qualitative ***I-U*** -Kennlinie angeben). In was unterscheidet er sich von einem *Ohmschen Kontakt* (qualitative ***I-U***-Kennlinie angeben)? Welche Materialien sind in beiden Fällen im Kontakt?
- Nenne (im Zweifel "gefühlt") einige andere Kontakte mit nicht-linearer Kennlinie (d. h. keine Ohmschen Kontakte).
- Wie macht man elektronisch interessante Kontakte ganz sicher *nicht* - und warum ? Wie macht man es, oder könnte es prinzipiell machen?
- Warum sind Diffusion und die Fickschen Diffusionsgesetze die Grundage *aller* Halbleitertechnologie?

Schnelle Fragen zu 9.3.2: Oberflächenzustände und Bandverbiegung

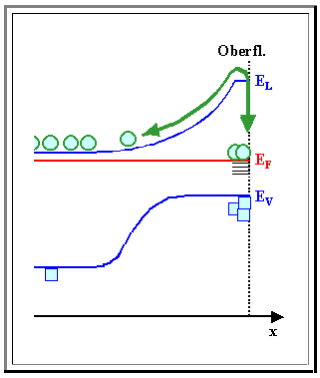
- Wie *dick* ist eine reale Oberfläche mindestens? Wieviele Atome pro **cm^2** finden ungefähr Platz auf der Oberfläche für einen Kristall mit Gitterkonstante ***a*** ?
- Warum gibt es für Elektronen an der Oberfläche Zustände in der Energielücke; oder generell *andere* Zustände als für Elektronen im Volumen?



- Wie groß ist in etwa die Zahl der Zustände für die gezeigten Oberflächenzustände in **cm^{-2}** und **cm^{-3}** (endliche Dicke beachten). Nebenbei: Wie kommt man von der Zustands*dichte* zur Gesamt*zahl*?
- Gegeben sei eine große Zahl von Oberflächenzuständen wie im nebenstehenden Bild angedeutet. Wo kann die Fermienergie nur liegen?
  Hinweis: Überwiegend nicht besetzt Zustände liegen immer oberhalb der Fermienergie.
- Wie sieht das Banddiagramm vermutlich an einer Korngrenze in polykristallinen Halbleitern aus?

- Was geschieht, wenn sich ein **n**-Halbleiter mit seiner Oberfläche "in Kontakt" setzt?
  Hinweis: Man versetze sich in die Lage der Elektronen im Leitungsband, die auf der Suche nach Plätzen mit niedrigerer Energie sind.
- Was geschieht, wenn sich ein **p**-Halbleiter mit seiner Oberfläche "in Kontakt" setzt?
  Hinweis: Man versetze sich in die Lage der Löcher im Valenzband, die auf der Suche nach Plätzen mit höherer Energie sind.
- Konstruiere für beide obigen Fälle das Banddiagramm; folge und erläutere dabie das "drei-Stufen-Rezept".
- Was für *Partialströme* fließen über die Raumladungszone? Wie groß sind sie? Was sind die treibenden Kräfte für diesen Stromfluss?
- Wieso ist die Fermienergie im Gleichgewicht überall gleich groß?
- Rutschen die Bänder an Stellen *negativer* Ladung "rauf" oder "runter"? Wie kann man sich das sofort klarmachen?

- Das nachfolgende Bild zeigt ein Banddiagramm, bei dem die Bandverbiegung in Leitungs- und Valenzband verschieden ist - die Löcher könnten ja andere Verhältnisse haben als die Elektronen. Warum ist das *Blödsinn* und komplett falsch?



Schnelle Fragen zu 9.3.3: Bandverbiegung und Raumladungszone

- Warum gibt es in *Raumladungszonen* so gut wie keine freien Ladungsträger? Nenne *zwei* Gründe!

1. $$C_{RLZ} = \frac{2 \cdot \epsilon_{Si} \cdot \epsilon_0 \cdot F}{d_{RLZ}}$$

2. $$C_{RLZ} = \frac{e^2 \cdot (N_D \cdot F \cdot d_{RLZ})}{\Delta E_F}$$

$$d_{RLZ} = \left(\frac{2 \cdot \epsilon_r \cdot \epsilon_0 \cdot \Delta E_F}{e^2 \cdot N_D} \right)^{1/2}$$

- Wir kommt man auf die erste Gleichung zur *Kapazität* einer Raumladungszone? Begründe insbesondere den Faktor **2**.
- Was soll man sich unter der Dielektrizitätskonstanten ϵ_{Si} eines Halbleiters vorstellen? Wie groß ist sie etwa? Welcher *Polarisationsmechanismus* ist beteiligt?
- Welche Definition einer Kapazität C steckt hinter der zweiten Gleichung? Was steht im Nenner und was im Zähler? Wo kommt der Ausdruck "*Kontaktspannung* " zum Tragen?
- Wie kommt man auf die Formel für die Weite d_{RLZ} der Raumladungszone (Herleitung).
- Wie ist die d_{RLZ}-Formel zu verändern, wenn man zusätzlich zur Kontakspannung noch eine *externe Spannung* U_{ex} anlegt?

- Wie groß ist in etwa das *elektrische Feld* E_{RLZ} in einer **RLZ**? Formel? Skizziere halbwegs quantitativ d_{RLZ} und E_{RLZ} über N_D.
  Hinweis: Die maximale Kontaktspannung hat etwas mit der Bandlücke zu tun
- Skizziere in einem Orstbild die Verteilung der Ladungen und das elektrische Feld im Halbleiter-Oberfläche Kontakt.
- Warum kann man die Kontaktspannung mit einem Voltmeter nicht messen?

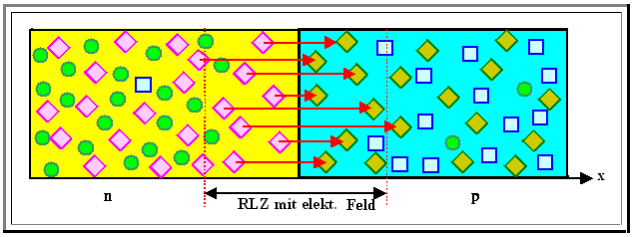
Übung 9.4-1

Schnelle Fragen zu

9.4 Der pn-Übergang

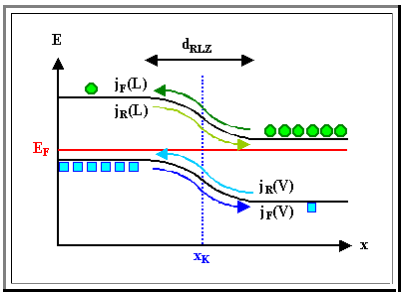
Schnelle Fragen zu 9.4.1: Grundsätzliches

- Zeichne das Banddiagramm eines **pn**-Übergangs im Gleichgewicht. Folge dabei dem drei-Stufen-Rezept.
- Wie groß ist die Dichte der Majoritäten n_{maj} und Minoritäten n_{min} in den Bereichen ohne Bandverbiegung? Gib die einfachen Näherungsformeln.
- Zeichne unter das Banddiagramm jeweils **log(n_{maj})** und **log(n_{min})**. Welche weitere Konzentration tritt zwangsweise prominent in Erscheinung; etwa in der Mitte des **pn**-Übergangs?
- Wie groß ist die Kontaktspannung in Formeln und ungefähr in Volt?
- Zeichne Partialströme in einem Band ein und begründe was sie treibt.
- Was geschieht mit *Majoritäts*ladungsträgern oder *Minoritäts*ladungsgträgern, wenn sie an den Rand der Raumladungzone diffundieren?
- Was ist im Bild unten dargestellt, was sind die Symbole?



- Wie ungefähr würde das Bild aussehen, wenn die Dotierkonzentrationen des **n**- und **p**-Teils sehr verschieden wären?
- Wieviel Minorititätsladungsträger rekominbinieren im Mittel pro Sekunde weit weg vom **pn**-Übergang? Wieviele werden generiert? Wie weit kommen sie im Mittel?

Schnelle Fragen zu 9.4.2: Ströme im pn-Übergang im Gleichgewicht



- Benenne die eingezeichenten Ströme in einem der Bänder (mindestens **2** Bezeichnungen).
- Was sind die treibenden Kräfte für diese Ströme?
- Zu was muss j_R notgedrungen proportional sein? (Gleichung)
  Hinweis : Man kann auf die Dauer nicht mehr Geld vom Konto abfliessen lassen, als eingezahlt wird.
- In welcher Größenordnung muss die Proportionalitätskonstante liegen? Welche Maßeinheit hat sie? Wäre es ein großer Fehler, sie **= 1** zu setzen?
- Wie groß ist j_F im Gleichgewicht ausgedrückt mit j_R? Wie könnte man j_F auch darstellen?
  Hinweis: Es geht darum, wieviele der gegen eine Energiebarriere anlaufenden Elektronen die Barriere überwinden können.
- Angenommen, der **n**-Teil ist viel stärker dotiert als der **p**-Teil. Welcher j_R ist größer?

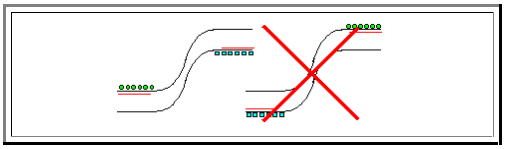
Schnelle Fragen zu 9.4.3: Die Kennlinie des pn-Übergangs

- Zeichne zwei Banddiagramme für einen **pn**-Übergang mit angelegter positiver oder negativer externer Spannung U_{ex}
  Hinweis 1: Überlegen, wo allenfalls noch Gleichgewichtsbedingungen als Näherung angenommen werden dürfen

  Hinweis 2: Mit der Größe der Spannung in Vorwärtsrichtung aufpassen!
- Was macht j_R als Funktion der Spannung qualitativ und quantitativ?
- Was macht j_F als Funktion der Spannung qualitativ? Wie ergibt sich daraus Durchlaß- und Sperrverhalten?
- Bergünde die folgende Gleichung, nutze ggf. eine j_F Gleichung von oben

$$|j_F(U_{ex})| = |j_F(U_{ex} = 0)| \cdot \exp \frac{+eU_{ex}}{kT} = |j_R| \cdot \exp \frac{+eU_{ex}}{kT}$$

- Wie lautet damit die Diodengleichung $j(U)$ für ein Band? Für beide Bänder? Wie lautet sie näherungsweise für $|U_{ex}| > 0.x$ V?
- Wie lautet die Beziehung zwischen Diffusionslänge L, Lebensdauer τ und Diffusionskoeffizient D? Schreibe damit j_R so um, dass entweder nur die Diffusionslänge oder nur die Lebensdauer vorkommt.
- Was passiert mit dem Sperrstrom einer Diode, wenn das zugrundeliegende **Si** "dreckig" ist.
  Hinweis: **Si** ist ein indirekter Halbleter, und die Lebensdauer τ hängt ab von ... ? Wie?
- Zeichne eine Diodenkennlinie a) linear, b) halblogarithmisch. Diskutiere den Zusammenhang mit der Diodengleichung und Grenzen.
  Hinweis : Es gilt immer der **1.** Haupsatz der MaWi.
- *Schwere Frage*: Warum findet man für den Sperrbereich zwar Bandidagramme wie unten links gezeigt, nie jedoch ähnliches für den Vorwärtsbereich (unten rechts)?
  Hinweise: Man berechne den Vorwärtstrom mit vernünftigen Annahmen für Spannungen **> 1 V**



Lösung zur Übung 9.1-1

Fermienergie in intrinsischen Halbleitern und Massenwirkungsgesetz

1. Zeige, dass für intrinsische Halbleiter die nachfolgende Gleichung gelten muss. Zeichne ein Banddiagramm mit dieser Fermienergie und einer passenden qualitativen Kurve der Fermiverteilung. Diskutiere, warum man das Ergebnis auch rein graphisch hätte erhalten können.

- Das ist einfach. Wir setzen die Ladungsträgerkonzentrationen gleich und erhalten:

$$N_{eff} \cdot \exp - \frac{E_L - E_F}{kT} = N_{eff} \cdot \exp - \frac{E_F - E_V}{kT}$$

$$E_L - E_F = E_F - E_V$$

$$E_F = \frac{E_L + E_V}{2}$$

- Damit liegt die Fermienergie in der Mitte der Bandlücke. *Achtung:* man macht gern den Fehler **½(E_L – E_V)** zu schreiben, weil man fast automatisch den Nullpunkt der Energieachse bei der Valenzbandkante annimmt. Das ist aber i. a. falsch. Selbst darüber nachdenken!
- Für die intrinsische Ladungsträgerdichte n_i erhält man damit

$$n_i = N_{eff} \cdot \exp - \frac{E_L - E_V}{2kT} = N_{eff} \cdot \exp - \frac{E_G}{2kT}$$

- Der zweite Teil der Frage ist im Rückgrat ausgeführt . Vor dem Nachschauen aber erst mal selbst nachdenken!

1. Leite das Massenwirkungsgesetz her. Gilt es nur für intrinsische Halbleiter? Was folgt für die Fermienergie, falls z.B. $n_e >> n_h$?

- Auch einfach: Wir multiplizieren die beiden Dichten:

$$n_e \cdot n_h = N^2_{eff} \cdot \exp - \frac{E_L - E_F - E_F + E_V}{kT}$$

$$= N^2_{eff} \cdot \exp - \frac{E_L + E_V}{kT}$$

$$= n^2_i$$

da der Exponentialterm gerade n^2_i darstellt.

Wir haben nirgends unterstellt, dass der Halbleiter intrinsisch ist. Das **MWG** gilt damit auch dann noch, wenn $n_e \neq n_h$ (also für dotierte Halbleiter)

- Wie ist das mit der Lage der Fermienergie, wenn die Ladungsträgerdichten ungleich sind? Bildet man den Quotienten aus den beiden Dichten erhält man nach kurzer Rechnung

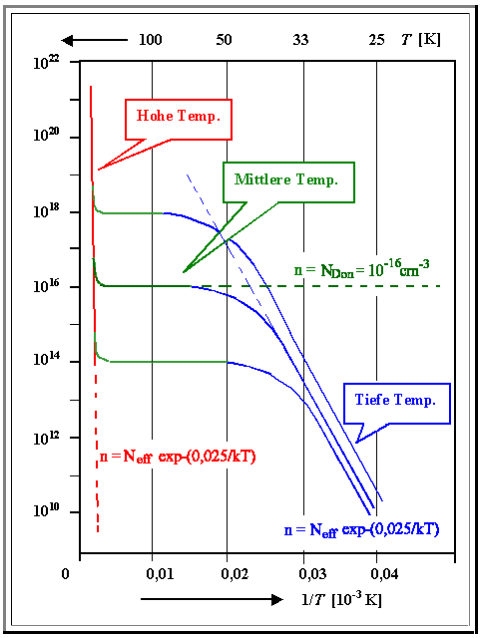
$$E_F = \frac{E_L + E_V}{2} + ½kT \cdot \ln \frac{n_e}{n_h}$$

- Als Beispiel betrachten wir $n_e = 100 n_h$. Mit **ln(100) = 4,60** und kT_R **= 1/40 eV** verschiebt sich die Fermienenergie also um **0,057 eV** aus der Bandmitte "nach oben" in Richtung Leitungsband.
- Damit haben wir auch schon den ersten Teil der Fragen "für Experten" gelöst: Man muss nur in obiger Gleichung die effektiven Zustandsdichten statt den Ladungsgträgerdichten einsetzen. Für den 2. Teil findet man alles was man braucht in diesem Link.

Lösung zur Übung 9.1-2

Bestimme die Ladungsträgerdichte als Funktion der Temperatur bei dotierten Halbleitern

- Hier ist eine (bekannte) Variante der gewünschten Kurve

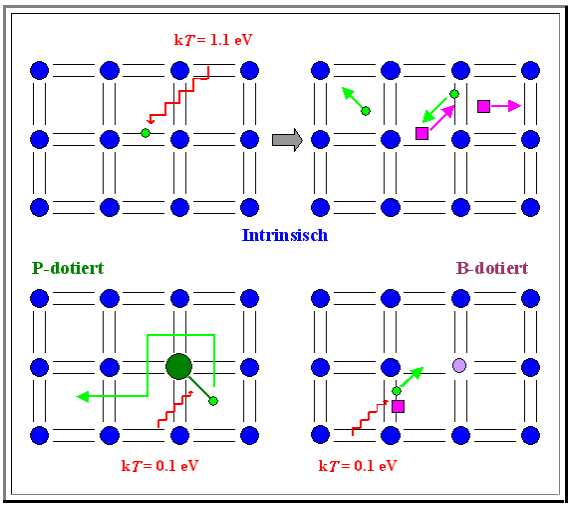


  - Zu diskutieren gibt's nicht viel außer, dass die Zahl der Elektronen, die vom Doterniveau und vom Valenzband ins Leitungsband geschickt werden, schlicht durch die jeweilige Energiebarriere gegeben ist; beide Prozess sind unabhängig.
  - Was jedoch vom Valenzband "kommt" ist bei "tiefen" ***T*** veranchlässigbar gegenüber dem Dotierniveau.
  - Das Dotierniveau ist jedoch bei höheren Temperaturen irgendwann "erschöpft" - mehr Elektronen als Dotieratome kann es nicht bereitstellen.
- Damit ist die Gesamtkurve klar: Man folgt der jeweils dominierenden der drei Kurven, mit sanftem Übergäng zur nächsten.

Elektronen und Löcher im Raum

Illustration

- Wir zeichnen einen **Si** (oder **Ge** oder **GaAs**, ...) Kristall mit seinen **4** Bindungen pro Atom schematisch mal so:



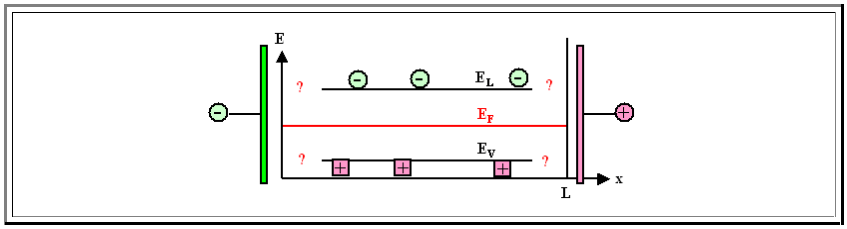
  - Selbstverständlich hat **Si** *kein* kubisches Gitter (sondern ???), aber so lassen sich die je *zwei* Elektronen in den *vier* Bindungen am besten zeichnen (als Strich).
- *Oben links* ist der perfekte intrinsische **Si** Kristall. Alle Elektronen sitzen in den Bindungen - oder, anderes Wort für dieselbe Sache, im **Valenzband** .
  - In dem hier gezeigten Ortsbild ist das so: die Bindungselektronen sind die Elektronen im Valenzband. Sie sind damit nicht so recht beweglich sondern am Atom, also auf Gitterplätzen mehr oder weniger lokalisiert - aber das haben wir im Potentialtopfbild auch schon immer so gezeichnet.
- Gelegentlich ist an einem Atom so viel thermische Energie konzentriert (es kommt eine hochenergetische Gitterschwingung vorbei; rote Zick-Zack Linie), dass ein Elektron aus der Bindung herausgeschlagen wird (= ins Leitungsband befördert wird).
  - Dort ist es jetzt *frei beweglich*, und zieht per "random walk" seines Weges. Es kann jetzt elektrischen Strom leiten.
- An seinem früheren Platz ist jetzt ein **Loch**. Man kann dem Loch eine positive Ladung zuordnen, da ja jetzt eine negative Ladung fehlt und das Gebiet vorher elektrisch neutral war. Das ist *oben rechts* gezeigt.
  - Es ist für ein anderes Elektron in der unmittelbaren Nachbarschaft problemlos möglich in das Loch "zu springen", d. h mit dem Loch den Platz zu wechseln.
  - Das Loch ist damit *frei beweglich*, und zieht per "random walk" seines Weges. Es kann jetzt elektrischen Strom leiten.
- Jetzt **dotieren** wir das Silizium - unten links mit Phosphor (**P**); unten rechts mit Bor (**B**).
- Wo immer nun ein Gruppe **V** Atom sitzt - und in der **Si** Praxis wird das fast immer entweder ein **P**- oder ein **As**-Atom sein - gibt es aus Bindungssicht ein Elektron *zuviel*. Dieses überzählige Elektron ist deshalb nur noch locker an das Dotieratom gebunden.
  - Falls wir dieses Elektron ablösen wollen, braucht es nur recht wenig thermische Energie. Dann ist es im Leitungsband, *frei beweglich*, und zieht per "random walk" seines Weges. Es kann jetzt elektrischen Strom leiten.
  - Es kann *nur* im Leitungsband sein, denn nur dort gibt es überhaupt freie Plätze für Elektronen - und ein Elektron ist ein Elektron ist ein Elektron - der Kristall weiß nicht, wem es mal "gehörte".
  - Zurück bleibt ein einfach *positiv* geladenes $\mathbf{P^+}$ (oder $\mathbf{As^+}$- *Ion*). Es ist absolut *ortsfest* (wir vernachlässigen Diffusion bei Raumtemperatur). *Ladungsneutralität* ist jetzt nur noch für den Gesamtkristall gewahrt; nicht mehr *lokal* .
- Wo immer nun ein Gruppe **III** Atom sitzt - und in der **Si** Praxis wird das *immer* nur ein **B**-Atom sein - gibt es aus Bindungssicht ein Elektron zu wenig. Diese *ungesättigte Bindung* ist am Dotieratom lokalisiert.
  - Falls wir aber einem der Elektronen in einer benachbarten Bindung einen kleinen Stoß geben, z. B. durch ganz wenig thermische Energie, wird es auf den freien Platz in der Nachbarbindung springen können. Der freie Platz ist jetzt in der Nachbarbindung und nicht mehr am **B**-Atom.
  - Statt eines Bor Atoms haben wir jetzt ein negativ geladenen $\mathbf{B^-}$ *Ion*; dafür hat ein **Si** Atom ein positiv geladenes Loch.
  - Es ist für ein anderes Elektron in der unmittelbaren Nachbarschaft problemlos möglich in das Loch "zu springen, d. h mit dem Loch den Platz zu wechseln. Das Loch ist damit *frei beweglich*, und zieht per "random walk" seines Weges. Es kann jetzt elektrischen Strom leiten.

Bandverbiegung im "Kondensator"

Illustration

- Wenn wir einen Halbleiter zwischen zwei isolierte Elektroden bringen, machen wir eine Art "Kondensatorversuch", der Halbleiter ist dann das "Dielektrikum".
  - Es ist sehr illustrativ, sich erst mal zu überlegen, was im Material geschieht, wenn wir gedanklich nacheinander einen *Isolator*, einen *Leiter* = Metall und einen *Halbleiter* zwischen die Platten unseres Kondensators stecken.
  - Es ist noch illustrativer, sich dabei qualitativ den Verlauf der Ladungsgsdichte, des elektrischen Feldes and des Potentials zu überlegen.
  - Obwohl das für ein Metall oder einen Isolator eigentlich zum Basiswissen gehört, ist der Fall des Halbleiters als Dielektrikum neu. Im Link wird die Thematik im Detaisl behandelt.
- Wie auch immer: Klar ist, daß bewegliche Ladungen zur Kondensatorplatte mit der entgegengesetzten Ladung laufen: Elektronen zu positiven; Löcher zur negativen Seite.
  - Das wird so lange geschehen, bis alle Ladungen auf der Kondensatorplatte einen "Partner" im Halbleiter haben. Wir erwarten also an der positiven Platte eine Anreicherung an Elektronen, und an der negativen Platte eine Abreicherung (was gleichbedeutend ist mit einer Anreicherung an Löchern).
  - Wir erwarten auch, daß nach einer kurzen Umverteilungsphase *Gleichgewicht* herrscht.
- Mehr muß man nicht wissen, um ein qualitatives Banddiagramm konstruieren zu können. Da wir hier zum ersten Mal ein Grundrezept zur Konstruktion von Banddiagrammen aller Arten durchkochen, machen wir es in **2** Schritten.
  - Wir starten mit zwei harten Fakten:

    1. Da wir *Gleichgewicht* haben, ist die Fermienergie per definition überall gleich. Wir können sie also als horizontale Linie zeichnen.
    2. Tief im Inneren des Halbleiters wird man von den geladenen Kondensatorplatten an den beiden Enden nichts mehr merken. Dort muß die Fermienergie deshalb in Bandmitte liegen.
  - Damit können wir Teile des Banddiagramms zeichnen:

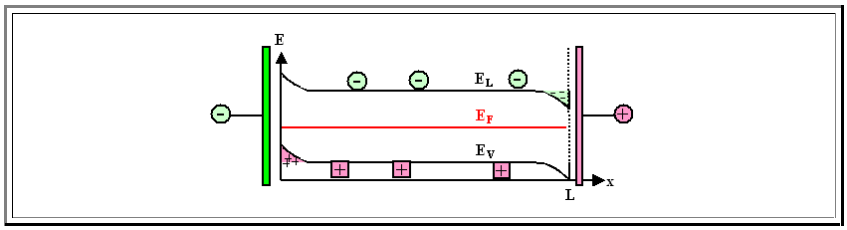


  - Die Fermienergie ist überall dieselbe; die Gleichgewichtskonzentration von Elektronen und Löchern im Inneren des Materials ist angedeutet. Im Grunde fehlt nur noch die geladenen Randschicht. Wie sieht sie aus im Banddiagramm?
- Das ist eigentlich ganz einfach: Wir wissen, daß am rechten Rand die Elektronenkonzentration erhöht sein muß. Das kann sich nur auf Elektronen im Leitungsband beziehen, andere können nicht nach rechts wandern. Wir wissen auch, daß die erhöhte Konzentration zeitlich stationär ist, da wir Gleichgewicht haben.
  - Damit ist die *lokale* Konzentration der Elektronen und Löcher ($n_L(x)$ bzw. $n_V(x)$) in *jedem* Abstand von der Elektrode durch die immer gleiche Generalformel gegeben:

$$n_L(x) = N^L_{eff} \cdot \exp - \frac{E_L(x) - E_F}{kT}$$

$$n_V(x) = N^V_{eff} \cdot \exp - \frac{E_F - E_V(x)}{kT}$$

- Die Konzentrationen sind jetzt *ortsabhängig*, und damit muß die Energie von Leitungsbandkante und Valenzbandkante ebenfalls *ortabhängig* werden - es gibt sonst keine Möglichkeiten mehr, Ortsabhängigkeiten einzubringen.
  - Eine Erhöhung der Elektronenkonzentration erfordert eine Erniedrigung von $E_L(x) - E_F$; für die Löcher muß $E_F - E_V(x)$ kleiner werden. Damit kann man das Banddiagramm fertigstellen:



- So "ungefähr" muß das Banddiagramm aussehen. Was wir allerdings hier *nicht* wissen können, ist die Ausdehnung der **Bandverbiegung** - in ***E***- und ***x***- Richtung.
- In anderen Worten: Wir wissen weder, wie tief die mit Elektronen oder Löcheren angereicherte Zone ins Innere des Materials eindringt, noch wie groß die Verbiegung auf der Energieachse ist. Aber das werden wir bald ändern.

Wir wissen aber schon, daß in Bereichen verbogener Bänder *immer* ein elektrisches Feld vorliegt. Die Ausdehnung der Bandverbiegung entspricht deshalb der Eindringtiefe des von den Kondensatorplatten ausgehenden elektrischen Felds.

- Dieser Eindringtiefe eines elektrischen Feldes in das Innere eines Materials geben wir einen Namen; sie heißt **Debye-Länge**.
- Die Debye-Länge eines gebenen Materials ist ein ziemlich fundamentaler Materialparameter; wir werden ihr (im Hauptstudium) noch oft begegnen. Nicht nur bei Halbleitern, sonder auch z.B. bei Ionenleitern.

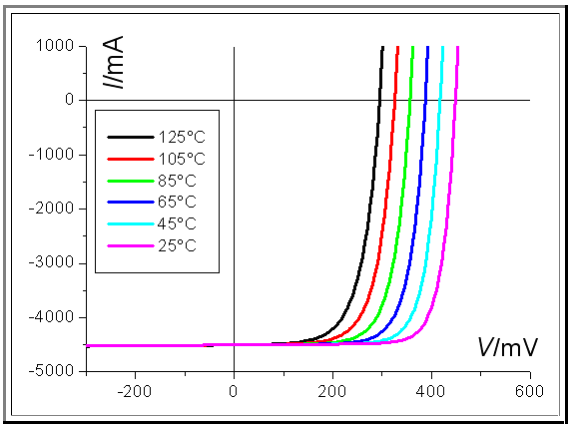
Es ist wichtig sich klar zu machen, daß dieses Rezept zur Konstruktion von (qualitativen) Banddiagrammen im Gleichgewicht *immer* funktioniert! Wir werden es noch oft benötigen.

Übung 10.1-1

Bestimme die Leerlaufspannung einer Solarzelle

1. Gegeben sei eine *ideale* **pn**-Übergangs-Kennlinie mit entsprechender Formel.

- Berechne daraus die Leerlaufspannung U_{OC} einer *idealen* Solarzelle. Gib Zahlen für vernünftige Größenordnungen der Parameter an und berechne damit Zahlenwerte für U_{OC}.
- Diskutiere die Temperaturabhängigkeit von U_{OC} und auch des Kurzschlußstromes I_{SC} zumindest qualitativ.



2. Obiges Bild zeigt die *gemessene* Kennlinie einer als sehr gut geltenden *realen* Solarzelle mit einer Fläche von ca. **100 cm²**.

- Vergleiche die Leerlaufspannung bei **RT** zum errechneten Ergebnis und ziehe Schlüsse.
- Vergleiche die Temperaturabhängigkeit mit der Erwartung. Um wieviel Prozent vermindert sich der Wirkungsgrad etwa bei **80 °C**? Ziehe Schlüsse zum Betrieb von Solarzellen in sonnenreichen Wüsten im Vergleich zum regenreichen Schleswig-Holstein.

Lösung

Übung 10.1-2

Quantitative Solarenergie

Beantworte folgende Fragen mit Hilfe der Faustregeln im Rückgrat

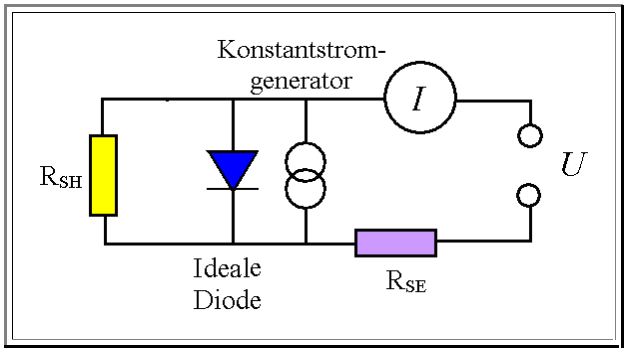
1. Mit wieviel **PS** oder **kW** bewegt sich ein Solarauto bestenfalls ohne zusätzliche Batterie?
2. *Gegeben:*
   Eine Jahresfahrleistung von **20 000 km**; ein **100 kW** Motor.

   Gesucht:
   - Schätzwert für die im Motor dazu umgesetzte Energie (in **kWh**)
   - Größe der Fläche für Solarzellen, die ausreicht um diese Energie zu sammeln (und per Batterie) dann dem Auto zur Verfügung zu stellen.
   - Was dürfen die Solarzellen ungefähr kosten (Benzinpreis = **1€/liter**; Lebensdauer Solarzellen ca. **20** Jahre).
3. Welche Fläche braucht man, um den laufenden elektrischen Energiebedarf einer **4**-köpfigen Durchschnittsfamilie durch Solarzellen zu decken? Reicht ein Hausdach? Was dürfen die Solarzellen kosten (**1 kWh = 0,1 €**)?

Lösung

Übung 10.1-3

Kennlinien und Probleme realer Solarzellen

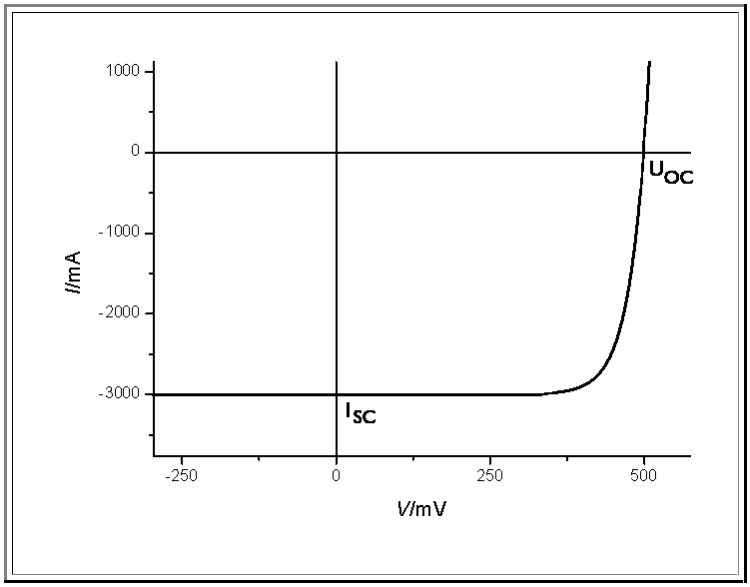


- Wir betrachten eine reale Solarzelle wie im Rückgrat beschrieben. Sie hat einen Serienwiderstand R_{SE} und einen Shuntwiderstand R_{SH} wie gezeigt.

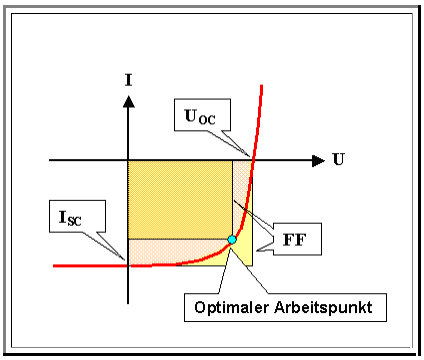
⇐ Das ist das Ersatzschaltbild

- Die Konstantstromquelle erzeugt den Solarstrom I_{Ph} durch den Lichteinfall; der Solarstrom ist nicht identisch mit dem I der fließt sobald man belastet, sondern muss (vorzeichenrichtig!) zum "Junctionstrom" $I_{junct} = I_{diode}(U) - I_{Ph}$ "addiert" werden.

- Wir nehmen eine reale I-U Kennlinie wie im Bild gezeigt um die wesentliche Größen zu definieren:



- Damit die **Frage**: Diskutiere (qualitativ wo nicht anders gefordert) den Einfluss der beiden Widerstände auf die Kennlinie. Betrachte zunächst nur die Grenzfälle mit $R_{SE} = 0\ \Omega$ bzw. $R_{SH} \Rightarrow \infty\ \Omega$. Beschreibe den Einfluss dieser Widerstände einzeln (und dann zusammen) auf :



- Die *Leerlaufspannung* U_{OC}.
- Den *Kurzschlusstrom* I_{SC}.
- Den *Sperrstrom im Dunkeln* fall die Soalrzelle "rückwärts" vorgespannt wird
- Den *Füllfaktor* ***FF*** (Die "Rechteckigkeit" der Kennlinie).
- Den *Wirkungsgrad* η; der durch U_{OC}, I_{SC} , und ***FF*** gegeben ist über:

$$\eta = \text{const} \cdot U_{OC} \cdot I_{SC} \cdot FF$$

- Der Füllfaktor **FF** ist der Quotient der gezeigten Rechtecke bezogen auf den optimalen Arbeitspunkt.

- *Hinweise:*

- Beginne mit der kompletten Gleichung für die Kennlinie und betrachte die Fälle *Kurzschluss* und *Leerlauf* .
- Überlege die Größenordnung sinnvoller Serienwiderstände. Ein guter Anfang ist, den Widerstand der idealen Diode bei U_{OC} zu berechnen (mit $R = \mathrm{d}U/\mathrm{d}I$ in diesem Falle).

Lösung

Übung 10.1-1

Schnelle Fragen zu

10.1 Solarzellen

Schnelle Fragen zu 10.1.1: Die einfache Solarzelle

- Vergleiche einen **pn**-Übergang im Dunkeln / bei Beleuchtung. Welcher Strom ändert sich stark? Wie stark? (= Formeln, Proportionalitäten, ...).
- Male in einem Banddiagramm was passiert, wenn Photonen der Energie $h\nu < E_G$; $= E_G$, $>> E_G$ "einschlagen".
- Wieviele Photonen (mit $E = 1$ **eV**) stecken in einer **kWh**?
- Erkläre die Begriffe: *Leerlaufspannung* ("open circuit") U_{OC}, *Kurzschlussstrom* ("short circuit") I_{SC}, *Füllfaktor* **FF**, *optimaler Arbeitspunkt*, *Wirkungsgrad* η im Zusammenhang mit Solarzellen. Verwende Kennlinienskizzen. Zeichne im Kennliniendiagramm eine qualitative Kurve zur Leistung im Zusammenhang mit Arbeitspunkten.
- Was bedingt den maximalen *theoretischen* Wirkungsgrad einer Solarzelle? (gib Zahlen falls möglich); was bedingt den *praktisch* möglichen Wirkungsgrad?
- Gib ungefähre (Zehner)zahlen (immer pro m^2) für
  - Maximale Sonnenleistung.
  - "Peak" Leistung von Solarzellen.
  - Mittelwert Solarzellen.
  - Mittlere Solarenergie pro Jahr.
  - Jahresbedarf elekt. Energie pro deutscher Kopf und Jahr.

Schnelle Fragen zu 10.1.2: Die reale Solarzelle

- Zeichen das Ersatzschaltbild einer realen Solarzelle und diskutiere die Komponenten.
- Der Wirkungsgrad der Solarzellen in Fabrik X ist zu klein, weil der durchschnittliche Kurzschlussstrom im Vergleich zu einer Spitzensolarzelle zu klein ist. Was könnten die Ursachen sein? Wie könnte Abhilfe geschaffen werden?
- Mit dem Wert der Sonnenleistung per m^2 (den man kennt), und dem ungefähren Wirkungsgrad einer Solarzelle (den man auch kennt) kann der Strom einer **(15 × 15) cm²** Solarzelle abgeschätzt werden; (die Spannung ist natürlich auch ungefähr bekannt).
  Wie groß ist der Strom so ungefähr? Was bedeutet das für die Größe des Lastwiderstands im optimalen Arbeitspunkt? Was muss geschehen, wenn die Sonneneinstrahlung sich ändert?
- Wie groß ist der Serienwiderstand einer **(15 × 15) cm²** großen Solarzellen mindesten, wenn die beiden Hauptstromschienen **5 mm** breit und **0,1 mm** hoch sind? Was folgt daraus?
- Was ist ein "Shuntwiderstand" R_{SH}, was ein Serienwiderstand R_{SE}?. Auf welchen Solarzellenparameter nehmen sie überwiegend Einfluss?

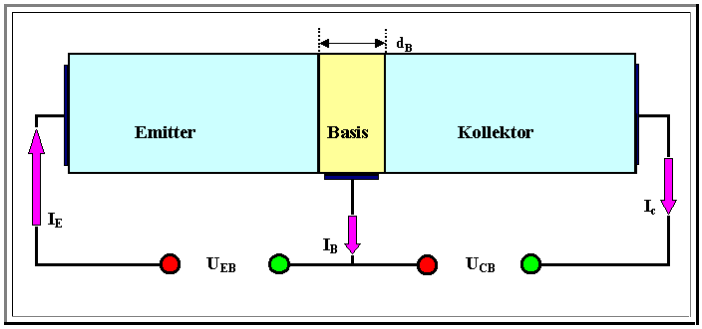
Übung 10.2-1

Schnelle Fragen zu

10.2 Transistoren

Schnelle Fragen zu 10.1.1: Der Bipolar Transistor

- Welche primäre Funktion hat ein Transistor in einer Digitalschaltung? Warum ist er ein Leistungsverstärker?
- Formuliere generelle Anforderungen an Transistoren (mindestens **4** Punkte) und diskutiere kurz, welche anderen elektrischen Bauteile diese Anforderungen auch erfüllen könnten.



- Aus welchen Materailien ist der obige Bipolartransistor grundsätzlich aufgebaut? Was ist geometrisch zu beachten? Welche Polaritäten sind für die Funktion an den Klemmen anzulegen?
- Wie macht man einen Bipolartransistor ungefähr?
  Hinweis 1: Das obige Bild zeigt sehr genau, wie ein realer Bipolartransitor *nie* aussieht. *Hinweis 2*: Stöbern in Hyperskripten hilft schnell.
- Zeichne ein Banddiagramm für den obigen Transistor mit Strömen; benutze dabei die Fermienergie nur als Anhaltspunkt.
- Zeichne die wesentliche Ströme im obigen Transistor; Pfeildicke ungefähr proportional zur Stromstärke. Formuliere die entsprechenden Stromgleichungen an den Knoten.
- Was ist und wie groß ist die Stromverstärkung β?

Schnelle Fragen zu 10.1.2: Der MOS Transistor

- Zeichne einen Querschnitt durch einen ***MOS*** Transistor. Erkläre das "**MOS**" an der Zeichnung.
- Erkläre die Wirkungsweise eines **MOS** Transistors; benutze dabei das Massenwirkungsgesetz.
- Zeichne das Source-Drain Strom – Gatespannungs Diagramm ($I_{SC}(U_G)$). Beachte und erkläre die Polaritäten.
- Wieviel **MOS** Transistoren enthält ein **1 Gbit DRAM** Speicher ungefähr? Wie groß ist ein Transistor etwa?
- Wie dick ist ein Gateoxide etwa? Was folgt für wichtige Dielektrikumseigenschaften wenn man bedenkt, bei welcher Spannung integrierte Schaltungen betrieben werden?
- Sollte das Gatedielektrika eher eine große oder eine kleine Dielektrizitätskonstante ϵ_r haben? Warum?

Lösung zur Übung 10.1-1

Bestimme die Leerlaufspannung einer Solarzelle

- Aufgaben dieser Art werden gerne als Prüfungsaufgaben genommen; deswegen hier keine Lösung

Lösung zur Übung 10.1.2

Quantitative Solarenergie

1. Mit wieviel **PS** oder **kW** bewegt sich ein Solarauto bestenfalls ohne zusätzliche Batterie?

Die verfügbare Autofläche, die man mit Solarzellen bedecken kann, ist in der Größenordnung von **10 m^2**. Bei maximaler Sonneneinstrahlung ("High Noon" am Äquator) hat man ca. **1 kW/ m^2**. Der Wirkungsgrad sehr guter Solarzellen liegt bei **20 %**.

- Wir haben also nominell eine Leistung von **2 kW**, oder nicht ganz **3 PS**, oder soviel wie **10** sehr gut trainierte Fahrradfahrer. Bedenkt man, dass nicht alle Solarzellen optimal ausgerichtet sein können, und dass zumindest in Schleswig-Holstein die Sonne nicht immer intensiv scheint, ist das *reine* Solarauto ein reiner Witz.

Die Lage ändert sich sofort, wenn das "Solarauto" eine Batterie hat, die die Solarenergie speichert die während des Stillstands generiert wird, und insbesondere wenn man noch die Dachfläche der Garage mit Solarzellen bedeckt.

2. *Gegeben:*
Eine Jahresfahrleistung von **20 000 km**; ein **100 kW** Motor.

- *Gesucht:*
  2.1 Schätzwert für die im Motor dazu umgesetzte Energie (in **kWh**).
  2.2 Größe der Fläche für Solarzellen, die ausreicht um diese Energie zu sammeln (und per Batterie) dann dem Auto zur Verfügung zu stellen.
  2.3 Was dürfen die Solarzellen ungefähr kosten (Benzinpreis = **1€/liter**; Lebensdauer Solarzellen ca. **20** Jahre).

2.1 Mit einem **100 kW** Motor dürfte der Verbrauch bei **10 l/100 km** liegen; d. h. um **2 000 l** im Jahr für **20.000 km**.

- In **1 l** Benzin ist eine Energie von ca. **10 kWh** gespeichert die vom Auto umgesetzt (und nur zu ca. **30 %** für Bewegung genutzt wird). Unser Auto verbraucht also **20 000 kWh**.

2.2 Nimmt man die maximale Sonneneinstrahlung von **1 kW/m^2** , einen typischen Wirkungsgrad von **15 %**, erhält man **150 W_p/^{2}** . **W_p** steht für "Watt peak", also Spitzenleistung. Die Durchschnittsleistung **W_d** in Norddeutschland is rund und roh **10 %** davon; also **W_d = 15W**.

- Übers Jahr gerechnet produziert **1 m^2** Solarzelle also **15 · 365 · 24 Wh = 130 kWh**. Um unser Auto zu versorgen benötigen wir **20 000 / 130 = 154 m^2**.
- Das relativiert sich aber sofort noch etwas: Elektrisch fahren wir mit sehr viel besserem Wirkungsgrad; sagen wir Faktor **2**. Wir brauchen nur noch **75 m^2**. Außerdem gewinnen wir die Bremsenergie zurück (E-Motor ist jetzt Generator); wir liegen so um **50 m^2** . Bis sowas großtechnisch kommt, sind die Wirkungsgrade der Solarzellen bei **20 %**; wir liegen bei **40 m^2**. Außerdem haben wir bis dahin auch den Verbrauch unseres Referenzautos auf **6 l / 100 km** reduziert, wir landen bei **< 30 m^2** und kommen so langsam in die Größenordnung der Garagendachfläche.

2.3 In **20** Jahren werden **40 000 l** Benzin konsumiert; das entspricht **40.000 €**

- Bei **30 m^2** Solarzellen können wir also **1 333 €/m^2** ausgeben
- Da der Benzinpreis in den nächsten **20** Jahren mit Sicherheit höher sein wird als **1 €/l** (heute (Mai **2008**) liegt er bei **1.5 €/l**) und Solarzellen heute schon sehr viel weniger kosten als **1 333 €/m^2**, ist die Konsequenz klar:

Es geht nicht mehr um's "Ob" sondern nur noch um's "Wie"!

3. Welche Fläche braucht man, um den laufenden elektrischen Energiebedarf einer **4**-köpfigen Durchschnittsfamilie durch Solarzellen zu decken? Reicht ein Hausdach? Was dürfen die Solarzellen kosten (**1 kWh = 0,1 €**)?

Wir müssen zunächst definieren: "Laufender" Bedarf = was man direkt dem Energieversorger für Elektrizität bezahlt. Das sind nur **< 40 %** der gesamten konsumierten elektrischen Energie (Beleuchtung am Arbeitplatz, Aufzug, was in die gekauften Produkte einfloss, ...).

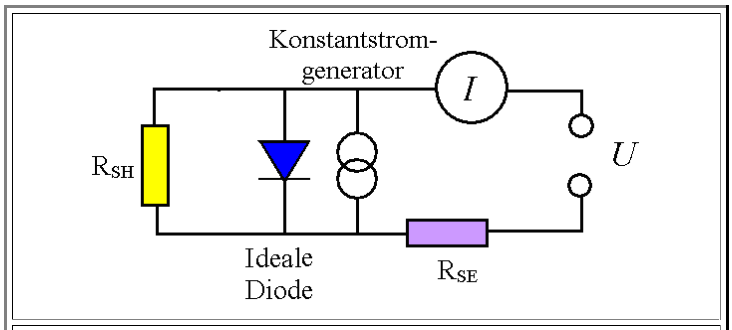
- Ein Blick auf die Elektrizitätsrechnung (oder ins Internet) zeigt: Ein "Kopf" konsumiert rund und roh **2 000 kWh** pro Jahr.
- Mit den Zahlen von oben haben wir **130 kWh/m^2**. Wir brauchen pro Kopf also eine Fläche von **2 000/130 m^2 = 15 m^2**. Vier Köpfe brauchen **60 m^2**; das gibt das Einfamilienhausdach locker her.

Geht man noch von abnehmendem Befarf und steigenden Wirkunsgraden aus, wird klar: Die Dachfläche für den laufenden Elektrizitätsbedarf hat jeder und jede irgendwo zur Verfügung!

Lösung zur Übung 10.1-3

Kennlinien und Probleme realer Solarzellen

Hier ist der Ausgangsgspunkt für die Lösung der Aufgabe:



$$I = I_1 \cdot \left(\exp \frac{eU_{pn}}{kT} - 1 \right) + \frac{U_{pn}}{R_{SH}} - I_{Ph}$$

$$U_{pn} = U - I \cdot R_{SE}$$

Diskutiere (qualitativ, wo nicht anders gefordert) den Einfluss der beiden Widerstände auf die Kennlinie. Betrachte zunächst nur die Grenzfälle mit $R_{SE} = 0\ \Omega$ bzw. $R_{SH} \Rightarrow \infty\ \Omega$. Beschreibe den Einfluss dieser Widerstände einzeln (und dann zusammen) auf

- *Leerlaufspannung*
- *Kurzschlusstrom*
- *Sperrstrom im Dunkeln*
- *Füllfaktor*
- *Wirkungsgrad*

Das ist ein umfangreiches Programm; aber machbar:

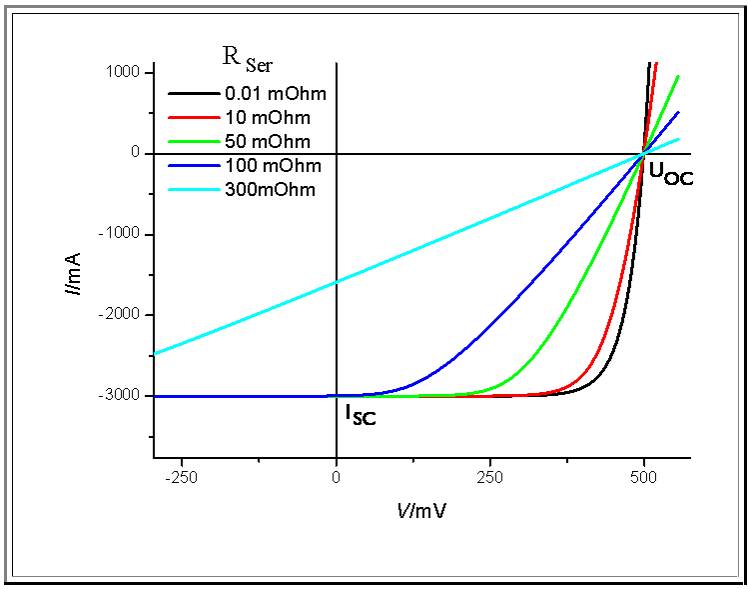
Serienwiderstand R_{SE}

Für einen erstmal vernachlässigbaren Shuntwiderstand R_{SH} können wir leicht ein paar qualitative Fakten deduzieren:

- Für $I = 0$ **A** haben wir $U_{pn} = U$. Das bedeutet, dass *alle* ***IU*** Kennlinien auf der Spannungsachse durch U_{OC} laufen müssen.
- Für große negative U (also Sperrrichtung) ist I schlicht konstant. Wir verlieren einen Teil der Spannung im Serienwiderstand, aber das macht nichts. Die Kennlinie im **3.** Quadranten hängt damit nicht von R_{SE} ab sofern $|U|$ groß genug ist.
- Für große positive U (also Vorwärtsrichtung) würde die ideale $U_{OC} \approx 0.5$ **V** Diode oberhalb von ca. **0.5 V** sehr große Ströme durchlassen, oder anders ausgedrückt, der Diodenwiderstand ($R_{diode} = dU/dI$) der idealen Diodenkennlinie wird sehr klein. Mit einem merklichen Serienwiderstand $R_{SE} > R_{diode}$ wird die ***IU*** Kennlinie vom Serienwiderstand dominiert werden, d.h. sie degeneriert zu einer Geraden mit Steigung $1/R_{SE}$.
- Im interessierenden **4.** Quadranten für Spannungen kleiner als U_{OC} fällt ein Teil der Spannung im Serienwiderstand ab. Der **pn**-Übergang hat weniger Spannung, der Strom kann also (*betragsmäßig* !) nur kleiner sein als bei der Kennlinie ohne Serienwiderstand. *Aufpassen!* Mit Vorzeichen ist er größer, denn **-3** ist größer als **-5**!

Setzt man das alles zusammen, muss man qualitativ Kennlinien erhalten, wie im folgenden Bild (sauber numerisch gerechnet!) gezeigt.

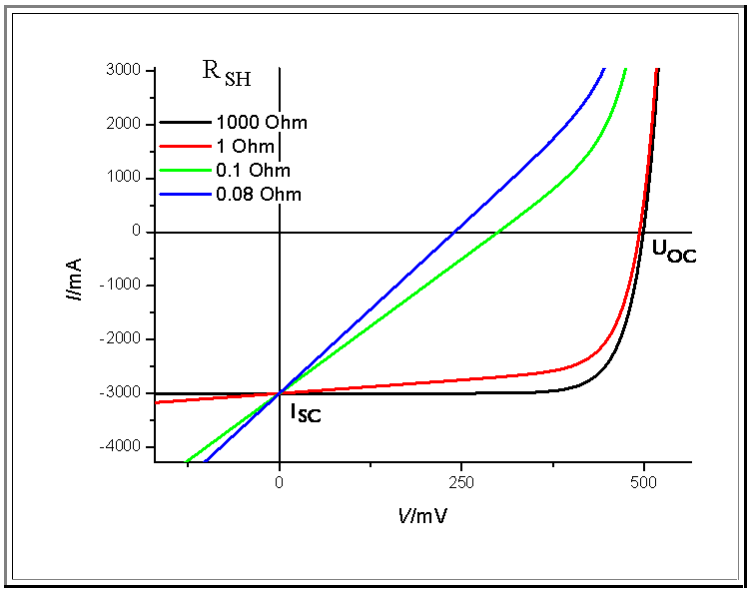
- Die Kennline zeigt unsere Referenz- Solarzelle mit Zahlen an den Achsen. Zumindest für die größeren Serienwiderstände sollte auch díe qualititave Lösung so ähnlich aussehen



- Wir können damit eine Reihe von Schlussfolgerungen ziehen
  - **1.** Der Wirkungsgrad η ist proportional zu $I_{SC} \cdot U_{OC} \cdot FF$. Für nicht zu große Serienwiderstände (im Beispiel oben R_{SE} **< 100 m**Ω) verringert ein Serienwiderstand also primär den Füllfaktor und reduziert damit den Wirkungsgrad η.
  - **2.** Während im normalen "elektrotechnischen" Leben Widerstände im Milliohmbereiche so gut wie keine Rolle spielen, sind hier einige **m**Ω schon deutlich spürbar.
  - **3.** Mit dem gegebenen spezifischen Widerstand bester Metalle von ca. $\rho \approx$ **2 µ**Ω**cm** sieht man, das ein **1 cm** langer **Cu** Draht mit einem **1 mm²** Querschnitt bereits einen Widerstand von R **= 2 m**Ω hat. Das bedeutet: Wir haben schon bei der Kontaktierung (dem "Grid" auf der Solarzelle) ein *massives Problem mit Serienwiderständen realer Solarzellen*!

Shunt Widerstand R_{SH}

- Für einen vernachlässigbaren Serienwiderstand können wir leicht ein paar qualitative Fakten deduzieren:
  - Es gilt immer $U_{pn} = U$. Für $U_{pn} = U = 0$ **V** müssen alle Kennlinien durch I_{SC} laufen, da $U_{pn}/R_{SH} = 0$.
  - Ansonsten haben wir alle Spannungen U in *Rückwärts-* und *Vorwärts* richtung den Strom $I_{SH} = U_{pn}/R_{SH}$ der zum Diodenstrom (vorzeichenrichtig) addiert werden muss. Das schiebt den Kennlinienstrom um U_{pn}/R_{SH} "nach oben" zu *kleineren* Absolutwerten und größeren "Vorzeichen"-Werten (siehe oben). Die vorher flache Kennlinie wird steil mit der Steigung $1/R_{SH}$
  - Im **4.** Quadrant, auf den es ankommt, verlieren wir Spannung und Füllfaktor, damit geht der Wirkungsgrad η kräftig runter.
  - Darüber hinaus nimmt der (Betrag) des Sperrstroms linear mit der Sperrspannung zu. Das ist ein großes Problem sobald unsere Solarzelle mit anderen verschaltet wird, d. h. in einem Solar*modul.*
- Hier sind die entsprechenden (wieder sauber numerisch berechneten) Kennlinien. Auch qualitativ muss man auf einen solchen Graphen kommen.



Wir können wieder einige Schlussfolgerungen ziehen:

- **1.** Der Wirkungsgrad η ist proprotional zu $I_{Sc} \cdot U_{OC} \cdot FF$. Falls R_{SH} nicht zu klein wird (im Beispiel $> \approx 1\Omega$), sind Shunts nicht allzu schlimm. Andererseits sind *richtige Kurzschlüsse* ($R_{SH} < \approx 1\Omega$) tödlich.
- **2.** Da Solarzellen sehr ausgedehnte **pn**-Übergänge haben, die außerdem noch bis zur "Kante" reichen, müssen wir mit vielen kleinen " *Kurzschlüsschen*" rechnen. Wie eine Reihe von kleinen lokalisierten "*Kurzschlüsschen*", die jeder für sich nicht viel Böses tun, die Gesamt-Solarzelle beeinflussen, die wir hier betrachten, ist ein trickreiches Problem (man kann sie nicht einfach "aufaddieren").