

Mechanische Störung $T > 0 K$ Thermische Anregung des Gitters!
 Position eines Ions $\vec{r}(t) = \vec{R} + \vec{r}_i(t)$; *Umwandlung Auslenkung*
 Entwickeln: $\exp(-i\vec{q} \cdot \vec{u}(t)) \approx 1 - i\vec{q} \cdot \vec{u}(t) - \frac{1}{2}(\vec{q} \cdot \vec{u}(t))^2 + \dots$
 $\psi_B = \psi_{B,el.} + \psi_{B,mel.} \Rightarrow$ Endliche Streukontinuität nur für
 Modifizierte Streubedingung: $\Delta \vec{r} \pm \vec{q} = \vec{u} - \vec{u}' \pm \vec{q} \stackrel{!}{=} \vec{G}$ *reflexe Umkehr
grd d. Ionen*
 kin. zeitlichen Mittel: $\omega = \omega_0 \pm \omega_q$ Phononen mit $E = \hbar \omega_q$
 und Quasikontinuum $\hbar \vec{q}$ (Impuls $\hbar \vec{q}$ wird an Kristall übertragen)
 Quadr. Term \Rightarrow Debye-Waller-Faktor $I = I_0 \exp(-\frac{1}{3} \langle \vec{q} \cdot \vec{u}(t) \rangle^2)$
 $\langle \vec{u} \rangle_t = \frac{1}{2} \langle \vec{u}(z) \rangle_t = \frac{1}{2} \langle \vec{u}(z) \rangle_t = \frac{3}{2} k_B T \Rightarrow I_{\text{DW}} = I_0 \exp(-\frac{4\pi^2}{3} \frac{k_B T}{\hbar^2} G^2)$
 $I \propto$ mit T^{-1} ! Bei konst. T : $I \propto$ mit $u + u + \ell$!, Bei RT $I_0 = 0,96$
 De-Broglie-Wellenlänge $\lambda = h/p = h/\sqrt{2mE}$

[illegible]

$$U = \sum_i n_i \epsilon_i \omega_i = \sum_i \frac{\epsilon_i \omega_i}{\exp(\epsilon_i / k_B T) - 1} \quad \omega_i \text{ liegen sehr dicht}$$

Anharmonische Effekte: Drei-Phonon-Prozess: $\vec{q}_1 + \vec{q}_2 = \vec{q}_3 + \vec{G}$ falls \vec{q}_3 nicht mehr in der 1.BZ Normalprozess $|\vec{G}| = 0$ Umklappprozess $|\vec{G}| > 0$ (Umkehr d. Ausbreitungs-r.)
 Wärme Stromdichte: $\vec{J} = -\lambda \nabla T$ Wärmeleitfähigkeit $\lambda = \frac{1}{3} \rho C_V v_s \Lambda$ aus Wm. Gask. Scher tiefe T : $\chi(T) \propto C_V(T) \propto T^3$ für höhere T : Mitl. freie Wegl. $\Lambda(T) \propto \frac{1}{T}$ \Rightarrow Wär. w. Widerstand
 Debye: $E_{ph} \approx \frac{k_B \Theta_D}{2} \Rightarrow \Lambda(T) \propto \begin{cases} \frac{1}{T^2} & T \ll \Theta_D \\ \frac{1}{T} & T \gg \Theta_D \end{cases}$ $\chi(T)$ hat Anteile: Thermische $P = T - T_0$ relative $\frac{P}{T}$ $\propto T$ linear Ausdehnungskoeffizient $\alpha = \frac{1}{T} \left(\frac{P}{T_0} \right) = \frac{3k_B}{4\epsilon_0 T_0}$
 Debye: $E_{ph} \approx \frac{k_B \Theta_D}{2} \Rightarrow \Lambda(T) \propto \begin{cases} \frac{1}{T^2} & T \ll \Theta_D \\ \frac{1}{T} & T \gg \Theta_D \end{cases}$ $\chi(T)$ hat Anteile: Thermische $P = T - T_0$ relative $\frac{P}{T}$ $\propto T$ linear Ausdehnungskoeffizient $\alpha = \frac{1}{T} \left(\frac{P}{T_0} \right) = \frac{3k_B}{4\epsilon_0 T_0}$

keine WW zw. Elektronen, keine WW zw. Elektronen und Atomrümpfen. (reines Elektronengas)

Fermi-Dirac-Verteilung: $f(\epsilon) = \frac{1}{\exp(\frac{\epsilon - \mu}{k_B T}) + 1}$ chemisches Potential $\mu(T=0) = \epsilon_F$ N = $\int D(\epsilon) f(\epsilon) d\epsilon$ Gibbsche Gleichung $d\mu = T dS - p dV + \sum \mu_i dn_i$ Sommerfeld-Entw. $\Rightarrow \mu(T) \approx \epsilon_F [1 - \frac{\pi^2}{12} (\frac{T}{T_F})^2]$
 innere Energie $U = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \int_0^\infty \frac{\epsilon^{3/2}}{\exp(\frac{\epsilon - \mu}{k_B T}) + 1} d\epsilon$ Sommerfeld-Entw. $\Rightarrow U = U_0 + (k_B T)^2 \frac{\pi^2}{6} D(\epsilon_F) \frac{3}{2} \frac{N}{\epsilon_F}$ Elektronen + Gitter $\Rightarrow C_V = \gamma T$ Sommerfeld-Koeffizient $\gamma = \frac{\pi^2}{2} N k_B \frac{1}{\epsilon_F} = \frac{\pi^2}{3} k_B^2 D(\epsilon_F)$ Wiedemann-Franz-Relation $\frac{\lambda}{\sigma} = L \cdot T$
 Wärmekleitf. $\lambda_{el} = \frac{1}{3} c_V v_F^2 \tau = \frac{\pi^2}{3} \left(\frac{k_B}{e} \right)^2 \sigma T$ Leitf. $\sigma = \frac{e^2 n \tau}{m}$ Leitf. $\lambda_{ges} = \lambda_{el} + \lambda_{ph}$, λ_{el} dominiert! Lorenz-Zahl $L = \frac{\pi^2}{3} \left(\frac{k_B}{e} \right)^2 \Rightarrow \lambda_{el} \propto T \cdot \frac{1}{\sigma} \propto \frac{T}{\sigma}$

Druckfeld-Modell $\vec{j} = -en\langle v \rangle = -en\frac{k_B}{m}\langle \vec{u} \rangle$, Korrektur: $\vec{j} = -\frac{e}{V} \sum_i \vec{u}_i$ im Ungleichgewicht: $\vec{j} = -\frac{en\hbar}{m} \vec{u}$, $\vec{u} = \langle \vec{u} \rangle - \langle \vec{u} \rangle$ Veränd. der Impulsverteil. $\frac{d\langle \vec{u} \rangle}{dt} = \frac{\partial \langle \vec{u} \rangle}{\partial t} \Big|_{\text{Kraft}} + \frac{\partial \langle \vec{u} \rangle}{\partial t} \Big|_{\text{Strom}}$ stationärer Zustand: $\frac{d\langle \vec{u} \rangle}{dt} = 0$
 $= -\frac{\hbar}{m} \frac{\partial \langle \vec{u} \rangle}{\partial t} \Big|_{\text{Kraft}} = -\frac{e\vec{E}}{m} \frac{\hbar}{m} \Rightarrow \vec{u} = -\frac{e\vec{E}}{m} \tau$ Nicht-Gleichgew. $\Rightarrow \vec{u}(\vec{r}, t) = \vec{u}_0 e^{-t/\tau}$ Relaxationszeitsatz $\vec{u} \rightarrow 0 \Rightarrow \vec{u} = -\frac{e\vec{E}}{m} \tau \Rightarrow \vec{v}_D = \frac{\hbar \vec{u}}{m}$ Mittlere freie Weglänge $\ell_F = v_F \tau = \frac{\hbar v_F}{m v_F}$

Elektronische Bänder gitterperiodisches Potential $V(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} V_{\vec{G}} e^{i\vec{G}\cdot\vec{r}}$ SGL im rez. Raum: $(2m-E)\psi(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} V_{\vec{G}} e^{i\vec{G}\cdot\vec{r}}$ für Ansatz $\psi(\vec{r}) = \sum_{\vec{k}} c_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ $\rightarrow \sum_{\vec{k}} c_{\vec{k}} (E - E_{\vec{k}}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = 0$
zu jedem \vec{k} unendlich viele Lsg.: $E_n(\vec{k}) = E_{\vec{k}}(\vec{k} + \vec{G}_n)$ (Energiebänder) Reduz. Brillouinzone: Nur 1. BZ Für $V(\vec{r}) = V(-\vec{r})$: $E_n(\vec{k}) = E_n(-\vec{k})$ Allgemein: $E_n(\vec{k}, t) = E_n(-\vec{k}, t)$ Bloch-Wellen
Bloch-Theorem: Eigenfkt. der SGL für gitterperiod. V sind $\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = u_{\vec{k}}(\vec{r}) \cdot e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ mit gitterp. Gesamt-Wf.: $\psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} w(\vec{k}, t)$ Wannier-Fkt.: $w(\vec{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} u_{\vec{k}}(\vec{r}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$

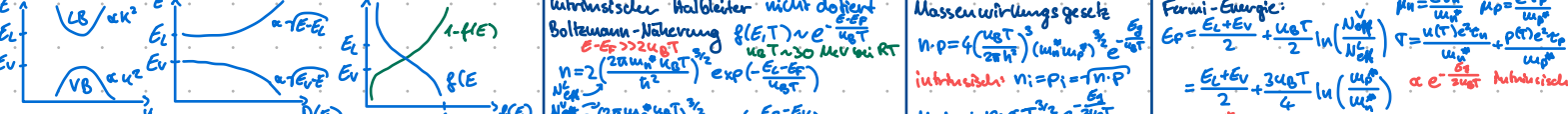
gitterperiodisches Potential $V(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} V_{\vec{G}} e^{i\vec{G} \cdot \vec{r}}$ SGL im rz. Raum: $(\frac{\Delta E}{2m} - E) c_0 + \sum_{\vec{G}} V_{\vec{G}} c_{\vec{k}-\vec{G}} = 0$ für Ansatz $\psi(\vec{r}) = \sum_{\vec{k}} c_{\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}$

$E(\vec{k}) = E(\vec{k}+\vec{G})$ (Energiekriterium) daher Zweifachdegen. 1BZ: $E(\vec{k}) = V(\vec{k}) = V(\vec{k}+\vec{G}) = E(\vec{k}+\vec{G})$ Block:

Abweichung am grössten am Rand der 1.BZ! $\Rightarrow E_{\vec{k}}^0 = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} + V_0$, $E_{\vec{k}-\vec{g}}^0 = \frac{\hbar^2 (\vec{k}-\vec{g})^2}{2m} + V_0$, $E^{\pm,0} = \frac{(E_{\vec{k}}^0 + E_{\vec{k}-\vec{g}}^0)}{2} \pm \sqrt{\frac{(E_{\vec{k}}^0 - E_{\vec{k}-\vec{g}}^0)^2}{4} + V_g^2} \Rightarrow$ Energiespalte $E_g = E^+ - E^- = 2|V_g|$ (am Rand der 1.BZ)

Isolator: $E_g \geq 4 \dots 5 \text{ eV}$ oder Halbleiter bei $E_g \geq 0,1 \dots 4 \text{ eV}$ Si: $E_g = 1,2 \text{ eV}$ Bandtransport $v(\vec{r}) = \vec{\nabla}_{\vec{k}} w(\vec{r}) = \frac{1}{\hbar} \vec{\nabla}_{\vec{k}} E(\vec{r})$ im äußeren el. Feld: $\hbar \frac{d\vec{k}}{dt} = \hbar \vec{k} = -e \cdot \vec{E}$ zul. falls \vec{E}, \vec{E} klein
 für Kristallelektron: $v_i = \frac{1}{\hbar} \sum_{\vec{k}; i, j} \frac{\partial^2 E}{\partial k_i \partial k_j} \cdot (-\hbar e_j) \Rightarrow$ Tensor der effektiven Masse $\frac{1}{m_{ij}^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E(\vec{r})}{\partial k_i \partial k_j}$ falls in Hauptachsenricht. Komp. gleich: $w = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 \Leftrightarrow E(\vec{r}) \approx E_0 + \frac{\hbar^2}{2m} k^2$ bei Extremum
 wachsende mit flacherer Krümmung haben kleinere effektive Masse. Falls bei Extremum eff. Masse-Näherung gilt: Fast alle Sommerfeld-Modell- Aussagen gültig.

$\epsilon = \epsilon_0 n$



$p(n) = p_0 \exp\left(\frac{E_n - E_F}{k_B T}\right)$ $p(p) = p_0 \exp\left(\frac{E_p - E_F}{k_B T}\right)$
 Diffusionspannung $U_D = E_F^n - E_F^p = k_B T \ln\left(\frac{n_p}{n_n}\right) = E_F^n - E_F^p = k_B T \ln\left(\frac{p(p)}{p(n)}\right)$
 $n = n_0 \cdot q \cdot d \cdot u \cdot F$ $Q_p = n_A \cdot q \cdot A \cdot d \cdot F$ Neutralität \Rightarrow Sperrschicht: Kondensator
 $d_n = \frac{2 \cdot e_0 \cdot \epsilon \cdot U_D}{q \cdot N_D}$ $d_p = \frac{2 \cdot e_0 \cdot \epsilon \cdot U_D}{q \cdot N_A}$ $N_D \cdot d_n = N_A \cdot d_p$
 Fall: n-dotierter HL Neutr.: $n = N_D^+ + p \Rightarrow$ Verknüpfung: $n \approx N_D^+ = N_D - N_0 = N_0 \left(1 - \left(1 + \exp\left(\frac{E_D - E_F}{k_B T}\right)\right)^{-1}\right)$
 E_D Donator-Störz.Niveau
 E_A Akzeptor-Störz.Niveau

Teil der Sperrschicht $d_s = \sqrt{\frac{2\epsilon_0 \epsilon_r (U_0 - U_a)}{q \cdot (N_D + N_A)}}$ $\Rightarrow d_s \approx d_0$ U_0
 Durchlassrichtung $\ominus \text{E-N} \oplus$ Sperrrichtung $\oplus \text{N-P} \ominus$
 Anteil an Ladungen, der Potentialbarriere überwindet: $\frac{I_n}{I} = e^{-\frac{e U_a (k_B T)}{k_B T}}$
 Gesamtstrom: $I(U_a) = (I_0 + I_{\text{Leak}}) \cdot \left(e^{\frac{e U_a}{k_B T}} - 1 \right)$ (Minoritätsträger)

I. Störstellenreserve Hefe T III. Leitfähiger Bereich $\log n$
 $n \approx N_D$ $n \approx N_A$ $n \approx N_D \cdot e^{-\frac{E_d}{k_B T}}$ $n \approx N_A \cdot e^{-\frac{E_a}{k_B T}}$
 II. Erschöpfungszustand wühl. T (Harm. Abklingung vom Elektronen)

aus VB über die Bandlücke E_g