

# Einführung in die Festkörperphysik - Zusammenfassungen\*

R. Vianden      P.-D. Eversheim

Sommersemester 2005

## Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Bindungstypen im Festkörper</b>	<b>2</b>
1.1	Ionische Bindung . . . . .	2
1.2	Kovalente Bindung . . . . .	2
1.3	Metallische Bindung . . . . .	2
1.4	Van der Waals-Bindung . . . . .	3
<b>2</b>	<b>Kristalle</b>	<b>3</b>
2.1	Arten: . . . . .	3
2.2	Definition: . . . . .	3
2.3	Symmetrie des Punktgitters . . . . .	3
2.4	Gittertypen . . . . .	4
2.5	Miller Indizes . . . . .	4
2.6	Reziproke Gitter . . . . .	4
2.7	Defekte in Kristallen . . . . .	4
2.8	Dynamik des Kristallgitters . . . . .	5
2.9	Phononen . . . . .	6
2.10	Wärmeleitung, Wärmewiderstand in Isolatoren . . . . .	6

---

\*Eine L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X-Mitschrift von Steffen Schaepe, Jan Hartmann und Christian Hammann

# 1 Bindungstypen im Festkörper

## 1.1 Ionische Bindung

- Tritt auf zwischen Atomen stark unterschiedlicher Elektronegativität (Gr. I / VII PSE)
- Weitgehend kompletter Ladungstransfer von einem Atom zum Anderen
- Ionenrümpfe können sich nicht durchdringen („Harte Kugeln“)
- Bindungsenergie setzt sich zusammen aus:
  - Ionisierungsenergie (Atom I)
  - Elektronenaffinitätsenergie (Atom II)
  - Energiegewinn in Coulombpotential bei Annäherung auf  $a_0$
- Bindung ist ungerichtet
- Potential

$$U(r) = -\frac{A}{r} + \frac{B}{r^m}, \quad B = 1 - 2\text{eV}, \quad m = 8 - 10$$

- Gitterenergie kann berechnet werden durch Summation über alle Ionen des Kristalls
- Für jeden Gittertyp ist die Madelung-Konstante charakteristisch

## 1.2 Kovalente Bindung

- Tritt auf zwischen Atomen, die beide ein Elektronendefizit haben
- Es werden gemeinsame Molekülorbitale gebildet
- Atomrumpf wird nach wie vor als harte Kugel betrachtet
- Absenkung der Gesamtenergie erfolgt durch Konzentration der Elektronen *zwischen* den Atomen
- Bindung ist stark gerichtet

## 1.3 Metallische Bindung

- Tritt auf zwischen Atomen mit Elektronenüberschuss
- Jedes Elektron gibt ein oder mehrere Elektronen an den Kristall ab (Ausschmierung, Elektronengas)
- Dabei wird die Gesamtenergie abgesenkt → Bindung
- Konsequenz: Der Kristall enthält frei bewegliche Elektronen → Leitung
- Die Metallische Bindung ist ungerichtet

## 1.4 Van der Waals-Bindung

- Tritt zwischen Atomen oder Molekülen mit abgeschlossenen Elektronenschalen auf
  - Kein Ladungstransfer
  - Bindung durch Wechselwirkung zwischen Dipolen (entweder induziert oder permanent)
- Abfall mit  $\frac{1}{r^6}$  bzw.  $\frac{1}{r^3}$
- 10 - 30 mal schwächer als Primärbindung

## 2 Kristalle

### 2.1 Arten:

Kristallin: periodisch in drei Dimensionen, langreichweitige Ordnung  
Translationssymmetrisch (Einkristall) mm - m

Polykristallin: auf kurzen Längenskalen ( $\mu\text{m}$  - mm) kristallin  
→ Körner / Korngrenzen

Amorph: Nahordnung; keine Fernordnung über einige mm

Beschreibung durch radiale Verteilungsfunktion

### 2.2 Definition:

- Kristall = (Punkt)gitter + Basis
- Punktgitter ist eine mathematische Konstante definiert durch die Basisvektoren  $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$   
⇒ Gittervektoren:  $\vec{R}_{hkl} = h\vec{a}_1 + k\vec{a}_2 + l\vec{a}_3$
- Basis: mindestens ein Atom → bel. kompliziertes Molekül
- Einheits- oder Elementarzelle: füllen den Raum lückenlos
- primitive EZ: enthält nur 1 Basis (Atom)
- $V_{EZ} = \vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)$

### 2.3 Symmetrie des Punktgitters

Translation:  $n\vec{a}_1, n\vec{a}_2, n\vec{a}_3, n$  ganzzahlig

Rotation: 1, 2, 3, 4 oder 6 zählige Achsen

Spiegelungen:  $m$  mirrorplanes

Inversion

## 2.4 Gittertypen

- 32 Kristallklassen
- 7 Kristallsysteme
- 14 Bravaisgitter
  - Die wichtigsten sind:
    - Kubisch-flächenzentriert kfc (fcc)
    - Kubisch-raumzentriert krz (bcc)
      - Stapelfolge ABCABC...
    - Hexagonal hcp
      - Stapelfolge ABAB...
    - 95% der Elementkristalle liegen in einer dieser Formen vor

## 2.5 Miller Indizes

- Eine Richtung im Gitter wird durch drei ganze Zahlen beschrieben. Dazu wird ein Vektor in die gewünschte Richtung mit den kleinstmöglichen ganzzahligen Komponenten der Basisvektoren gewählt.
- Auftretende negative Zahlen werden mit einem Überstrich gekennzeichnet
- Die Zahlentripel werden in
  - [ ] gesetzt wenn es sich um eine spezielle Richtung handelt.
  - $\langle \rangle$  wenn es sich um die Klasse der Richtungen handelt.

## 2.6 Reziproke Gitter

Vektoren:

$$\vec{g}_1 = 2\pi \frac{(a_2 \times a_3)}{a_1 \cdot (a_2 \times a_3)} = 2\pi \frac{(a_2 \times a_3)}{V_{EZ}}$$
$$\vec{g}_2 = 2\pi \frac{(a_3 \times a_1)}{a_1 \cdot (a_2 \times a_3)} = 2\pi \frac{(a_3 \times a_1)}{V_{EZ}}$$
$$\vec{g}_3 = 2\pi \frac{(a_1 \times a_2)}{a_1 \cdot (a_2 \times a_3)} = 2\pi \frac{(a_1 \times a_2)}{V_{EZ}}$$

## 2.7 Defekte in Kristallen

Defekte bestimmen sehr weitgehend die Eigenschaften realer Kristalle

1. 0-dimensionale- oder Punktdefekte, Leerstellen, Zwischengitteratome
  - Konzentration

$$c_{LS}(T) = \frac{n_{LS}}{N} \exp\left(-\frac{H_{LS}^f}{kT}\right)$$

- Unterteilung:
    - Schottky-Defekte: Thermisch generiert,  $H_{\text{LS}}^f = gkTm$
    - Frenkel-Defekte: Nicht thermisch generiert,  $H_{\text{LS+ZGA}}^f \approx 35kTm$
2. 1-dim Defekte
    - Stufen-, Schraubversetzungen, Riss
      - Charakterisiert durch Burgersvektor und Linienvektor
  3. 2-dim Defekte
    - Oberflächen
    - Korngrenzen
    - Stapelfehler
  4. 3-dim Defekte
    - Hohlräume (Voids, Cavities, Bubbles)

## 2.8 Dynamik des Kristallgitters

- Adiabatische Näherung ( $e^-$  immer bei  $E_{\text{kin}}$ )
  - Harmonische Näherung für das Potential
1. 1-atomige lineare Kette
    - Ebene Wellen:  $\Psi(k, t) = \exp(i(kna - \omega t))$
    - Dispersionsrelation:  $w = 2 \cdot \sqrt{\frac{K}{m}} \sin\left(\frac{1}{2}k\omega\right)$
    - Rechts- und linkslaufende Wellen sind äquivalent
    - Maximalfrequenz  $\omega_{\text{max}} = 2 \cdot \sqrt{\frac{K}{m}}$
    - Nur eine Dispersionsrelation für alle Atome ( $n$  fällt weg)
    - Darstellung in der ersten Brillouinzone ausreichend
    - Bewegungen, die zu Dichtefluktuationen führen
      - ⇒ akustisch (1 longitudinal akustisch, 2 transversal akustisch)
    - Periodische Randbedingung für endliche Kristalle
      - ⇒  $N$  erlaubte  $k$ -Werte bei  $N$  EZ
  2. 2-atomige Kette
    - Ebene Wellen
    - Dispersionsrelation mit zwei Zweigen:
      - akustisch mit 1 LA, 2 TA
      - optisch mit 1 LO, 2 TO

- Werte bei  $k \approx 0$ :  $\omega_- = 0$  akustisch  $\quad \omega_+ = \frac{2K}{m \cdot M/m + M}$  optisch
- bei  $k = \frac{\pi}{2}$ :  $\omega_- = \sqrt{\frac{2K}{M}}$ ,  $\omega_+ = \sqrt{\frac{2K}{m}}$
- in beliebigem Kristall: 3 akustische Äste,  $3z - 3$  optische Äste  
 $z$ : Anzahl der Atome in EZ

## 2.9 Phononen

1. Phononen: Quanten des Verschiebungsfeldes der Atome
2. Können wie (Quasi-)Teilchen behandelt werden
3. Energie eines Phonons:  $E_{\text{Ph}} = \hbar\omega$
4. Impuls:  $\vec{p} = \hbar\vec{k}$  (Kristallimpuls)
5. Kristall in der Anregungsstufe  $n = 10$  bei  $\vec{k}_i$  enthält 10 Phononen mit  $\vec{k}_i$
6. Phononen können erzeugt und vernichtet werden
7. Spin = 0  $\Rightarrow$  Bosonen

## 2.10 Wärmeleitung, Wärmewiderstand in Isolatoren

- das rein harmonische Gitterpotential führt zu unendlich guter Wärmeleitung, es gibt keine Wechselwirkung zwischen Phononen
- Phononen können wie Teilchen eines idealen Gases behandelt werden
- Wellenpakete  $\Delta x = \frac{1}{\Delta k}$  groß gegen Dimension der Einheitszelle aber klein gegen die des Kristalls
- Einführung anharmonischer Terme im Potential (3. und 4. Ordnung)  
 $\rightarrow$  Phonon-Phonon-Streuung: Normalprozesse, Umklappprozesse
- nur die Umklappprozesse erzeugen einen Wärmewiderstand
- Temperaturverlauf des Wärmeleitungskoeffizienten  $K = \frac{1}{3}c_V v_G l$  wird bestimmt durch
 

$l$	{	$T \ll \Theta_D$ $l$ konst., abhängig von Kristalldim.
	}	$T \gg \Theta_D$ $l$ sinkt mit $\frac{1}{T}$
$c_V$	{	$T \ll \Theta_D$ $c_V$ steigt mit $T^3$ (Debye Modell)
	}	$T \gg \Theta_D$ $c_V$ konst. (Dulong-Petit)