

# Werkstoffe der Elektrotechnik - Formelsammlung

## 1. Aufbau der Materie

### 1.1 Quanten und Wellen: Wellennatur der Materie

Planck: diskrete Energiemerte:  $E_n = h \cdot f \cdot \left(n + \frac{1}{2}\right) = \hbar \cdot \omega \cdot \left(n + \frac{1}{2}\right)$   $n$ : Quantenzahl

$h$ : Planck'sches Wirkungsquantum  $= 6,62 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$

$\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1,054 \cdot 10^{-34} \text{ Js} = 6,6 \cdot 10^{-16} \text{ eVs}$

Klassisch:  $E = M \cdot \omega^2 \cdot \frac{x_0^2}{2} = \left(n + \frac{1}{2}\right) \cdot \hbar \omega$

$x_0 \hat{=}$  Schwingungsamplitude  $x_0$  eines schwingenden Körpers der Masse  $M$

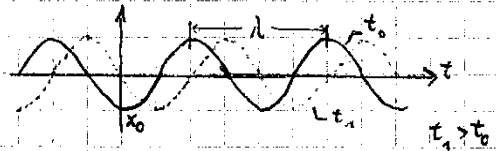
Energie eines Photons:  $\hbar \cdot \omega$  bzw.  $h \cdot f$

Masse und Impuls eines Photons:  $m_{ph} = \frac{\hbar \omega}{c^2}$   $p_{ph} = m_{ph} \cdot c = \frac{h}{\lambda}$  ; Wellenzahl:  $k = \frac{2\pi}{\lambda}$

für elektromagnetische (optische) Wellen gilt:  $\omega = c \cdot k$

### 1.1.1 Materiewellen

ebene Welle:  $\Psi(\vec{r}, t) = C \cdot e^{i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r})}$   
Wellenfunktion



$$\hbar \omega = E = \frac{1}{2} m v^2$$

$$\hbar \vec{k} = \vec{p} = m \cdot \vec{v}$$

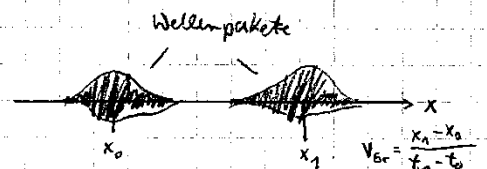
Dispersionsbeziehung  $\omega(k)$  der Materiewelle bewegter Teilchen der Masse  $m$  im kraftfreien Raum!

$$\omega = \frac{\hbar}{2m} \cdot k^2$$

Phasengeschwindigkeit:  $v_{ph} = \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar k}{2 \cdot m} = \frac{v}{2}$  für  $\phi(\vec{r}, t) = \omega t - \vec{k} \cdot \vec{r} = \text{konst.} = 0$

$v \hat{=}$  Gruppengeschwindigkeit  $v_{gr}$  (der Einhüllenden):

$$v_{gr} = \frac{d\omega}{dk} = \frac{p}{m} = v$$



Heisenbergsche Unschärferelation

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$$

$$\Delta t \cdot \Delta E \geq \frac{\hbar}{2}$$

### 1.1.2 Die Schrödingergleichung

allg. (zeitabhängig): 
$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r}, t) \cdot \Psi(\vec{r}, t)$$

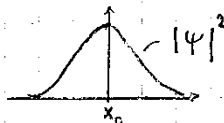
eindimensional gilt:  $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2}$ ,  $V$ : Potential [Energie],  $\Psi$ : Wellenfunktion

zeitunabhängige Schrödingergleichung: 
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\vec{r}) + V(\vec{r}) \Psi(\vec{r}) = E \cdot \Psi(\vec{r})$$

### 1.1.3 Deutung der Wellenfunktion

Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte (= Wahrscheinlichkeit pro Volumeneinheit) eines

Teilchens am Ort  $\vec{r}$ : 
$$|\Psi(\vec{r}, t)|^2 = \Psi^*(\vec{r}, t) \cdot \Psi(\vec{r}, t)$$



Wahrscheinlichkeit, ein Teilchen im Volumenelement  $d\vec{r} = dx dy dz$  um  $\vec{r}$  zum Zeitpunkt

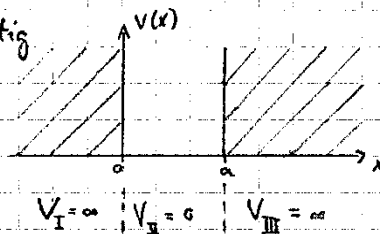
$t$  zu finden: 
$$dW(\vec{r}) = \Psi^*(\vec{r}, t) \cdot \Psi(\vec{r}, t) \cdot d\vec{r}$$

Normierungsbedingung: 
$$\int_{\text{Volumen}} \Psi^*(\vec{r}, t) \cdot \Psi(\vec{r}, t) d\vec{r} = 1$$

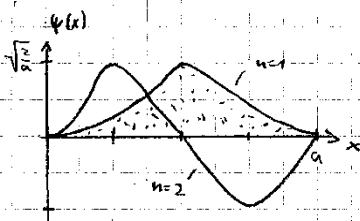
Bedingungen für  $\Psi$ -Funktion: sie ist endlich, stetig und eindeutig;

$\frac{\partial \Psi}{\partial x}$  ist ebenfalls stetig

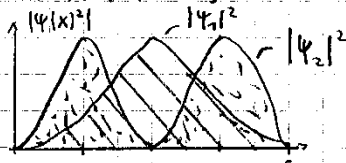
Potentialverlauf  $V(x)$  für einen Potentialtopf:



Wellenfunktion:



Wahrscheinlichkeitsdichte:



diskrete Energieeigenwerte / Energieeigenwerte eines gebundenen Elektrons im eindimensionalen

Potentialtopf: 
$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2 m_0 a^2} \cdot n^2$$
,  $n = 1, 2, 3, \dots$ ,  $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ ; es gilt:  $E = h \cdot f$ ;  $f = \frac{c}{\lambda}$

Wellenfunktion: 
$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n \cdot \pi}{a} \cdot x\right)$$

$n$ : Quantenzahl;

$n=1$ : Grundzustand;  $n=2$ : erster Anregungszustand

Gebundenes Elektron im dreidimensionalen (würfelförmigen) Potentialkasten (Breite  $a$ ):

$$\psi_{nml}(x, y, z) = \sqrt{\frac{8}{a^3}} \sin\left(\frac{n \cdot \pi}{a} \cdot x\right) \cdot \sin\left(\frac{m \cdot \pi}{a} \cdot y\right) \cdot \sin\left(\frac{l \cdot \pi}{a} \cdot z\right)$$

$$E_{nml} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_0 a^2} \cdot (n^2 + m^2 + l^2)$$

$n=1, 2, \dots$   $m=1, 2, \dots$   $l=1, 2, \dots$   
ganze Zahlen / Folge der Randbedingungen

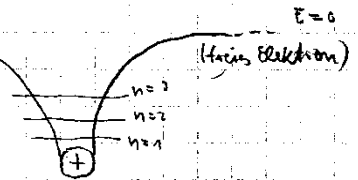
"entartete Zustände"  $\Leftrightarrow$  Zustände, in welchen verschiedene Kombinationen von Quantenzahlen gleiche Energieeigenwerte liefern

Entartungsgrad:  $2 \times$  Anzahl entarteter Zustände eines Energieeigenwertes ( $\times 2$  wg. Spin)

Es gilt:  $n > l \geq |m|$ , mögliche Werte:  $2l+1$ , mögliche Zustände für jedes  $n$ :  $n^2$

### 1.2 Das Wasserstoffatom

potentielle Energie:  $V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$



diskrete Eigenwerte der Gesamtenergie:  $E_n = -\frac{m_0 e^4}{2(4\pi\epsilon_0 \hbar)^2} \cdot \frac{1}{n^2}$   $n=1, 2, 3, \dots$

Grundzustand:  $n=1 \Rightarrow E_1 = -13,6 \text{ eV} \hat{=}$  Energie, die bei Ionisierung des Wasserstoffatoms aus dem Grundzustand aufgebracht werden muss.

Hauptquantenzahl  $n=1, 2, 3, 4, \dots \Leftrightarrow$  K-, L-, M-, N-Schale } radiale Abhängigkeit

Nebenzahl  $l=0, 1, 2, \dots, n-1 \Leftrightarrow$  s-, p-, d-, f-Zustand } Bahndrehimpuls

magnetische Quantenzahl  $m = -l, -l+1, \dots, 0, l-1, l$

Spinquantenzahl:  $s = \pm \frac{1}{2}$

Maximale Anzahl an Elektronen pro Orbital:

s-Zustände: 2

p-Zustände: 6

d-Zustände: 10

f-Zustände: 14

K-Schale: 2 (1s)

L-Schale: 8 (2s + 2p)

M-Schale: 18 (3s + 3p + 3d)

⋮

allg.:  $2 \cdot n^2$  Zustände  $\hat{=}$  Entartung bei Wasserstoffatom

## 1.3 Aufbau des Periodensystems

### 1.3.1 Hundtsche Regeln

1. Hundtsche Regel: Der Gesamtspin  $S$  einer nicht vollständig besetzten Schale setzt sich

aus den Einzelspins  $s_i$  der Elektronen so zusammen, daß die Spinquantenzahl  $|S|$

maximal wird (Parallelstellung der Spins):  $S = \sum_i s_i$   $s_i = \frac{1}{2} (\uparrow)$  oder  $-\frac{1}{2} (\downarrow)$

2. Hundtsche Regel: Die  $z$ -Komponente des Gesamtdrehimpulses  $L$  setzt sich aus den

Einzel Drehimpulsen der Elektronen - unter Beachtung der 1. Hundtschen Regel - so

zusammen, daß die Quantenzahl  $|L|$  maximal wird.

3. Hundtsche Regel: Der Gesamtdrehimpuls  $J$  beträgt  $|J| = \left| |L| - |S| \right|$ , wenn

Elektronenschale weniger als halb voll (Bahndrehimpuls und Spin sind antiparallel),

ansonsten gilt:  $|J| = |L| + |S|$

Et. Übung 2 WS 2000/2001 gilt:  $|J| = J_z$   $|L| = L_z$

Beispiel:  ${}_{23}\text{Co} = [\text{Ar}] 3d^7 4s^2$

für " $4s^2$ ": Elektronenschale abgeschlossen  $\Rightarrow S = L_z = J_z = 0$

für " $3d^7$ ":  $n = 3$ , da M-Schale (1  $\rightarrow$  K, 2  $\rightarrow$  L, 3  $\rightarrow$  M, ...)

$l = 2$ , da d-Zustand (0  $\rightarrow$  s, 1  $\rightarrow$  p, 2  $\rightarrow$  d, 3  $\rightarrow$  f)

$m = -2 \quad -1 \quad 0 \quad 1 \quad 2$  (allg.:  $m = -l, -l+1, \dots, 0, \dots, l-1, l$ )

$s = \uparrow \quad \uparrow \quad \uparrow \quad \uparrow\downarrow \quad \uparrow\downarrow$  (7 Elektronen im d-Zustand)

$$\Rightarrow S = 5 \cdot \uparrow + 2 \cdot \downarrow = 5 \cdot \frac{1}{2} + 2 \cdot \left(-\frac{1}{2}\right) = \frac{3}{2}$$

$$\Rightarrow L_z = (-2) \cdot 1 + (-1) \cdot 1 + 0 \cdot 1 + 1 \cdot 2 + 2 \cdot 2 = 3$$

$\Rightarrow$  es befinden sich 7 von max. 10 Elektronen im d-Zustand:

$$|J| = J_z = \left| \frac{3}{2} \right| + 3 = 4 \frac{1}{2}$$

## 1.4 Bindungstypen

1. Ionische Bindung
2. Kovalente Bindung
3. Metallische Bindung
4. Dipolbildung

in Festkörperphysik von Bedeutung, da diese starke Bindungen (Bindungsenergie  $> 1 \text{ eV}$ ) erzeugen

### 1.4.1 Ionische Bindung

Element	Ionisierungsenergie
<sub>1</sub> H	13,6 eV
<sub>11</sub> Na	5,1 eV
<sub>55</sub> Cs	3,9 eV

Element	Ionisierungsenergie
<sub>2</sub> He	24,6 eV
<sub>10</sub> Ne	21,6 eV
<sub>18</sub> Ar	15,8 eV
<sub>54</sub> Xe	12,1 eV

Reaktionspartner sind unterschiedliche Atome und können relativ leicht zu positiven und negativen Ionen ionisiert werden.

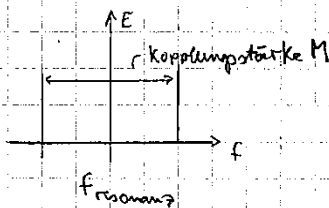
elektrostatische Energie: (entsteht bei Molekülbindung)

$$E_{el} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_0}$$

$r_0$ : Abstand der Ionenmittelpunkte  
(Summe Einzelradien)

### 1.4.2 Kovalente Bindung

Spinabsättigung der äußeren Elektronenschale durch gemeinsame Elektronen, die sich im wesentlichen zwischen den Atomen befinden.



- Kovalente Bindungen treten abgesehen vom Wasserstoff bei und zwischen Elementen der II. und VII. Hauptgruppe ( $N = 4 \dots 7$ ) auf.
- Anzahl der möglichen kovalenten Bindungen:  $8 - N$
- Wellenfunktion der Bindungselektronen haben ausgeprägte Maxima  $\Rightarrow$  kovalente Bindungen sind gerichtete Bindungen
- Valenzelektronen sind zwischen Atomen lokalisiert  $\Rightarrow$  kovalent gebundene Kristalle sind üblicherweise schlechte Leiter (Isolatoren, Halbleiter)

- in Praxis häufig Mischung der ionischen und kovalenten Bindung, z.B. bei den Verbindungshalbleitern wie GaAs

### 1.4.3 Metallische Bindung

-6-

- Sonderfall der kovalenten Bindung, bei der die bindenden Valenzelektronen nicht lokalisiert sind
- Überwiegend bei Elementen, die nur wenige Außenelektronen haben
- Elektronen sind frei beweglich  $\Rightarrow$  gute elektrische und thermische Leitfähigkeit  
 $\Rightarrow$  metallische Bindungen sind nicht gerichtet
- metallische Bindung ist schwächer als die ionische oder kovalente Bindung
- Bindungsstärke hängt stark von der Zahl der Leitungs-Elektronen ab:

	Kalium ( $K = [Ar] 4s$ )	Titium ( $Ti = [Ar] 3d^2 4s^2$ )
Anzahl Valenzelektronen	1	4
Dichte	$0,86 \text{ g/cm}^3$	$4,51 \text{ g/cm}^3$
Schmelzpunkt	$86^\circ\text{C}$	$1667^\circ\text{C}$
Gitterkonstante	$0,304 \text{ nm}$	$0,124 \text{ nm}$

### 1.4.4 Dipolbildung

- spielt bei Raumtemperatur bei Kristallen kaum eine Rolle, da Bindung nur schwach
- tritt zwischen Molekülen mit permanentem Dipolmoment auf (z.B.  $\text{HCl}$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{NH}_3$ )

#### Sonderformen:

##### a, Van-der-Waals-Bindung (schwach):

Atome und Moleküle besitzen nur vorübergehend ein schwaches Dipolmoment durch statische

Fluktuationen der Ladungsschwerpunkte bei der Elektronenbewegung

(Fluktuiierende Dipolmomente)

##### b, Wasserstoffbrückenbindung:

- Atome stark elektronegativer Elemente (Fluor, Sauerstoff) können in Kristallen Bindungen über Wasserstoffbrücken eingehen

- die Brücke hat die Form A-H-A, ist also immer nur zwischen zwei Atomen möglich.
- Bindungsenergie:  $\approx 0,1 \text{ eV}$
- bei organischen Stoffen von höchster Bedeutung: Karbonylgruppe, DNS, OH-Gruppe

-7-

## 1.5 Aggregatzustände der Materie

### 1.5.1 Gase

- weder Nah- noch Fernordnung
- punktförmige Atome (kein Eigenvolumen)
- keine zwischenatomaren Kräfte (Atome bzw. Moleküle haben sehr großen Abstand)

Gasgleichung für ideale Gase:  $p \cdot V = N \cdot R \cdot T$   $\frac{L \cdot N}{V} = n$

$p$ : Druck,  $V$ : Volumen;  $R = 8,31 \text{ J/mol} \cdot \text{K}$ : Gaskonstante,  $T$ : absolute Temperatur

$N$ : Anzahl der Mole (Molzahl, Stoffmenge)

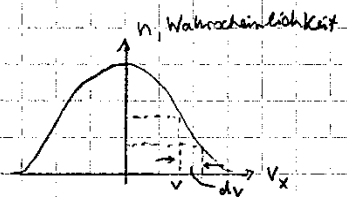
$R = k_B \cdot L$   $L$ : Loschmidt-Zahl = Zahl der Teilchen pro Mol;  $k_B$ : Boltzmann-Konstante

$p = \frac{1}{3} \cdot n \cdot m \cdot \bar{v}^2$   $n$ : Teilchendichte;  $m$ : Masse;  $\bar{v}^2$ : mittl. Geschwindigkeitsquadrat

$\frac{1}{2} m \bar{v}^2 = \frac{f}{2} \cdot k_B \cdot T$   $f$ : (Translations)freiheitsgrade,  $f=3$  für einatomige Gase und zweiatomige Moleküle

### Maxwell'sche Geschwindigkeitsverteilung:

$$n(v) = 4\pi v^2 \cdot n \cdot \left( \frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{\frac{3}{2}} \cdot e^{-\frac{m v^2}{2 k_B T}} \cdot dv$$



$n$ : Dichte,  $v$ : Geschwindigkeit,  $m$ : Masse

### 1.5.2 Flüssigkeiten

- beinahe größtmögliche Packungsdichte
- wenig komprimierbar, geringe Wärmeausdehnung
- Nahordnung, aber keine Fernordnung
- isotrop

### 1.5.3 Festkörper

- ein Kristallin: Halbleiter: Si, GaAs, Ge  
SiO<sub>2</sub> für Schwingquarze
- polykristallin: Metalle und Legierungen als Leiter oder Kontakte,  
Keramiken als Isolatoren oder Substrat für Schaltungen
- amorph: SiO<sub>2</sub> als Passivierung von Halbleiterbauelementen
- Kunststoffe: Isolatoren, z.B. PTFE (Polytetrafluoräthylen)

- 8 -

### 1.6 Kristallstrukturen

a) einfache (primitive) kubische Elementarzelle (engl.: simple cubic, Abk.: sc):

- beschreibt Anordnung der nächsten Nachbarn in einigen Ionenkristallen (z.B. NaCl)
- Atome an den 8 Eckpunkten eines Würfels

b) kubisch raumzentrierte Elementarzelle (engl.: body centered cubic, Abk.: bcc):

- Atome an den 8 Eckpunkten und im Schnittpunkt der Raumdiagonalen eines Würfels
- Beispiele: Cr, W, Mo, V,  $\alpha$ -Fe (unter 900°C)

c) kubisch flächenzentrierte Elementarzelle (engl.: face centered cubic, Abk.: fcc):

- Atome an den 8 Eckpunkten und den 6 Schnittpunkten der Flächendiagonalen eines Würfels
- Beispiele: Ag, Au, Cu, Al, Ni, Pb, Pd, Pt,  $\gamma$ -Fe (über 900°C)

d) hexagonale Elementarzelle:

- Struktur entsteht durch Schichtung von dichtesten ebenen Kugellagen
- Beispiele: Mg, Cd, Zn, Be

e) Diamantgitter (gleichartige Atome) / Zinkblendgitter (zwei verschiedene Atomarten):

- Kombination zweier kubisch flächenzentrierter Teilgitter, die in allen drei Raumrichtungen um  $\frac{1}{4}$  der Gitterkonstanten gegeneinander verschoben sind
- Beispiele Diamantgitter: C (Diamant), Ge, Si
- Beispiele Zinkblendgitter: GaAs, InP, CdS

Die höchste Raumfüllung (74%) erreichen die kubisch dichteste Packung (fcc) und die hexagonal dichteste Packung (hexagonale Einheitszelle)



f) Polymorphie: Auftreten eines Stoffes in verschiedenen Kristallstrukturen

• Beispiele: Kub. raumzentriert / Kub. flächenzentriert: Fe

Kub. flächenzentriert / hexagonal: Ca, Ni, Ti, Zr

hexagonal / Diamantgitter: C (Graphit / Diamant)

	sc	bcc	fcc
Anzahl der Atome in einer EZ *)	$8 \cdot \frac{1}{8} = 1$	$8 \cdot \frac{1}{8} + 1 = 2$	$8 \cdot \frac{1}{8} + 6 \cdot \frac{1}{2} = 4$
Abstand der nächsten Nachbarn	$a_0$	$\sqrt{\frac{3}{4}} a_0 \approx 0,866 a_0$	$\frac{\sqrt{2}}{2} a_0 \approx 0,707 a_0$
Zahl der nächsten Nachbarn	6	8	12
Packungsdichte P **)	$\frac{1}{6} \pi \approx 0,52$ $(r = \frac{1}{2} a_0)$	$\frac{\sqrt{3}}{8} \pi \approx 0,68$ $(r = \frac{\sqrt{3}}{4} a_0)$	$\frac{\sqrt{2}}{6} \pi \approx 0,74$ $(r = \frac{\sqrt{2}}{4} a_0)$

\*\*) allg.:  $P = \frac{\text{Volumen (Atome)}}{\text{Volumen (EZ)}}$  hier:  $P = \frac{\frac{4}{3} \pi \cdot r^3}{a_0^3}$  \*) vgl. 2.1

## 1.7 Metalle und Legierungen

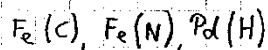
Def.: eine Legierung besteht aus heterogenen Werkstoffen, von denen mindestens ein Bestandteil ein Metall ist und die metallischen Charakter haben.

- Beispiel:
- Klotzinn: Zweistofflegierung aus Blei und Zinn
  - elektrische Widerstände: Dreistofflegierungen (Cu (Cr/Mn))
  - Weichmagnetstoffe (Mu-Metalle): Vierstofflegierung aus Ni, Cu, Cr und Fe
  - Mischkristalle werden auch bei Halbleitern verwendet, z.B.  $\text{Al}_x \text{Ga}_{1-x} \text{As}$

### 1.7.1 Arten der Mischkristallbildung

a) M. durch Substitution (etwa gleiche Größe der Atome): Au-Ag, Ge-Si

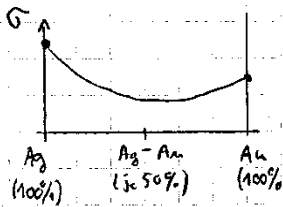
b) M. durch Einlagerung (Atome, die im lösenden Metall sind und kleiner als die des gelösten:



c) Intermetallische Verbindungen (bildet neuen Stoff / keine echte Legierung)

- es treten nur ganz bestimmte stöchiometrische Mischverhältnisse auf
- Verbindungen kristallisieren meist in einem ganz anderen Kristallgitter als die Mischpartner
- Beispiel:  $\text{Cu}_2 \text{Mg}$ ,  $\text{Fe}_3 \text{C}$ , GaAs

Leitfähigkeit von Mischkristallen:



=> die Leitfähigkeit  $\sigma$  nimmt bei Mischkristallen stark ab!

### 1.7.2 Ausgleichsvorgänge in Mischkristallen

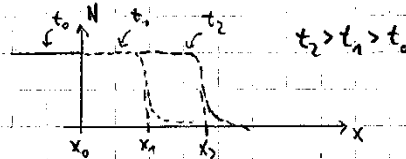
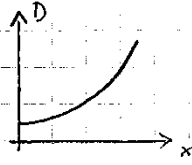
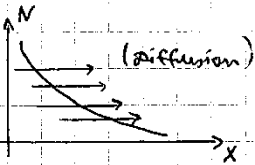
Diffusion: Teilchenbewegung durch thermische Anregung => Teilchenstromdichte  $S$

$$S = -D \cdot \frac{dN}{dx}$$

(Ficksches Gesetz)

$N$ : Teilchenkonzentration

$D$ : Diffusionskoeffizient



$$D(T) = D_0 \cdot e^{-\frac{E_D}{k_B T}}$$

$$x_D = \sqrt{D \cdot t}$$

$x_D$ : Diffusionslänge,  $E_D$ : Aktivierungsenergie

$$E_D = E_L + E_P$$

$E_L$  und  $E_P$ : Aktivierungsenergien zur Bildung einer Leerstelle  $E_L$  und der für einen Platzwechsellvorgang  $E_P$

wichtige diffusionsgesteuerte Prozesse:

- Bildung von Oxidschichten
- Eindiffusion von Dotierstoffen in Halbleitern
- Alterung von Halbleiter-Bauelementen

### 1.8 Keramiken und Gläser

- Keramik: nicht metallische, anorganische Werkstoffe
- Anwendung von Keramik in der Elektrotechnik:
  - Isolatoren (Elektropotenzialen, Glas)
  - Verbundstoffe aus Metall und Keramik (Cermet-Widerstände)
  - Substrate in der Mikroelektronik ( $Al_2O_3$ )
  - Ferrimagnetika (Keramische Spinellstrukturen)
  - Ferroelektrika ( $BaTiO_4$ )

- Keramik: polykristalline und/oder amorphe Bestandteile. Zwischenatomare Kräfte.

Zwischenatomare Kräfte sind kovalent und ionisch

⇔ Keramische Phase zeigt hohe mechanische und chemische Stabilität:

- hoher Schmelzpunkt
- große Härte
- extrem niedrige elektr. Leitfähigkeit

### 1.8.1 Dichtgepackte Keramische Kristallgitter

- Keramische Gitter sind mehratomig.

- Bezeichnungen:
  - A und B: positiv geladene Kationen
  - X: Anionen (z.B. O [Sauerstoff])
  - O: Sauerstoff

- wichtigste Gitterstrukturen / Typen:

- AX: MgO, MnO, FeO (kristallisiert im NaCl-Gitter)
- AX<sub>2</sub>: TiO<sub>2</sub> (Titaniumoxid: hohe Dielektrizitätskonstante)
- AB<sub>2</sub>O<sub>3</sub>: Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> [ $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> oder Korund] (extrem niedrige elektr. Leitfähigkeit und hohe Wärmeleitfähigkeit [als Substratmaterial geeignet]),  
Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub> und Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (Cernit-Widerstände); Typ kristallisiert im Perowskit (CaTiO<sub>3</sub>)-Gitter
- AB<sub>2</sub>O<sub>4</sub>-Gitter (Spinell-Gitter): MgAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub>, ZnAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub> (Magnitokeramik [Ferrite])

### 1.8.2 Silikatstrukturen

- auf Silikat-tetraeder aufgebaut: 1 Si-Atom ( $r = 0,026 \text{ nm}$ ) und 4 O-Atome ( $r = 0,138 \text{ nm}$ )
- Glasbildner: SiO<sub>2</sub>, B<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, P<sub>2</sub>O<sub>5</sub> und GeO<sub>2</sub>
- Keramische Kondensatordielektrika (besteht aus Magnesiumsilikate, Titaniumoxid und Erdalkalititanaten)

Verbindung:	MgTiO <sub>3</sub>	CaTiO <sub>3</sub>	SrTiO <sub>3</sub>	BaTiO <sub>3</sub>
$\epsilon_r$ :	20	120-180	220-340	800-2000

je größer die Ordnungszahl der Erdalkalititanaten ist, desto größer ist  $\epsilon_r$

## 2. Mechanische Eigenschaften der Festkörper

### 2.1 Dichte

$\rho = \frac{m}{V}$	$\rho = \frac{m \cdot P}{\frac{4}{3} \pi r^3}$	$\rho = \frac{m \cdot N}{a_0^3}$
----------------------	--	----------------------------------

mit:  $m = A_r \cdot 1,6605 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$  (Atommasse),  $A_r$ : relative Atommasse

$r$ : Atomradius

$P$ : Packungsdichte

$a_0$ : Gitterkonstante (kubisch)

$N$ : Anzahl der Atome in der Elementarzelle (vgl. 1.6)

Beispiele: • siehe 1.6

• Metalle:

- Au (kfz):  $P = \frac{\pi}{2\sqrt{2}}$ ,  $N = 4$ ,  $a_0 = 2\sqrt{2} r$ ,  $r = 144,2 \text{ pm}$ ,  $A_r = 197$   
 $\Rightarrow \rho = 19,27 \text{ g/cm}^3$

• Halbleiter:

- Si (Diamantgitter):  $P = 0,34$ ,  $A_r = 28$ ,  $r = 117,6 \text{ pm}$   
 $\Rightarrow \rho = 2,32 \text{ g/cm}^3$

• Anorganische Werkstoffe:

- Sandstein:  $\rho \approx 2 \text{ g/cm}^3$

- Titankeramik:  $\rho \approx 5 \text{ g/cm}^3$

• Organische Stoffe (= Kunststoffe):

- Teflon (PTFE):  $\rho \approx 2,5 \text{ g/cm}^3$

### 2.2 Elastische Verformung

• Dehnung in  $x$ -,  $y$ - bzw.  $z$ -Richtung:  $\epsilon_{xx} = \frac{\partial u_x}{\partial x}$ ;  $\epsilon_{yy} = \frac{\partial u_y}{\partial y}$ ;  $\epsilon_{zz} = \frac{\partial u_z}{\partial z}$

• Scherdeformation in der  $xy$ -, der  $yz$ - bzw. der  $xz$ -Ebene:

$$\epsilon_{xy} = \frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial x}, \quad \epsilon_{yz} = \frac{\partial u_y}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial y}, \quad \epsilon_{xz} = \frac{\partial u_x}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial x}$$

mit  $\vec{u}(\vec{r})$ : Lageänderung der Gitterpunkte

• Normalspannungen:  $\sigma_{xx}, \sigma_{yy}, \sigma_{zz}$

• Tangentialspannungen:  $\sigma_{xy}, \sigma_{yz}, \sigma_{xz}$

-13-

• bei nicht zu großen Verzerrungen gilt:  $\underline{\sigma} = \underline{C} \cdot \underline{\epsilon}$  (linear),  $\underline{C}$ : Federkonstante

• Hydrostatische Kompression:

$$\epsilon = \epsilon_{xx} = \epsilon_{yy} = \epsilon_{zz}; \quad \sigma_{xx} = \sigma_{yy} = \sigma_{zz} = \boxed{(C + 2\lambda)\epsilon = -P}$$

$$K = -\frac{P}{\Delta V/V} = \frac{C + 2\lambda}{3} = \frac{E}{3(1-2\nu)} \quad K: \text{Kompressionsmodul}$$

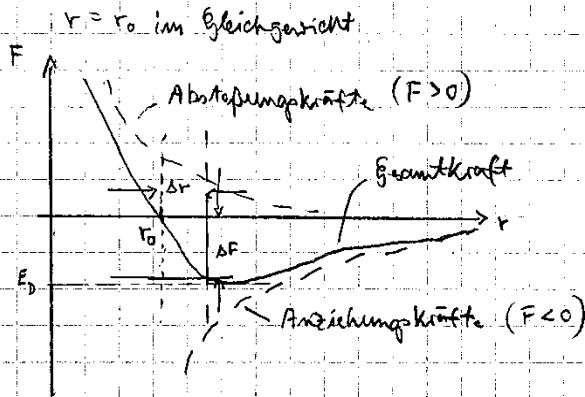
mit:  $\nu$ : Poisson-Zahl (in Metallen:  $\approx 0,3$ )

$\lambda$ : Querkontraktion

$$NI: \quad \frac{\Delta V}{V} = 3\epsilon$$

• Wechselwirkungsenergien:  $V(r) = \underbrace{-\frac{\alpha}{r^n}}_{\text{anziehend}} + \underbrace{\frac{\beta}{r^m}}_{\text{abstoßend}} \quad m > n$

$n=1$  für Coulomb-Anziehung in der ionischen Bindung



• Elastizitätsmodul:  $\sigma = E \cdot \epsilon$  mit  $\epsilon = \frac{\Delta r}{r_0}$

$$E = \frac{\Delta F}{r_0^2} / \frac{\Delta r}{r_0} = -\frac{1}{r_0} \cdot \left. \frac{\partial F}{\partial r} \right|_{r=r_0} = n \cdot (m-n) \cdot \frac{\alpha}{r_0^{n+3}} \quad m > n$$

• im Gleichgewicht ( $r = r_0$ ) gilt:  $* F(r) = -\frac{dV(r)}{dr}; F(r_0) = 0$

\* mechanische Spannung:  $\sigma = \frac{\Delta F}{r_0^2}$

• Temperatur  $\uparrow \Rightarrow$  Ausdehnung der Kristalle  $\Rightarrow r_0 \uparrow, \sigma \downarrow$

## 2.3 Akustische Wellen im Festkörper

• isotropes Medium:  $v_{||} = \sqrt{\frac{c}{\rho}}$  reine longitudinale akustische Welle (Druckwelle)

$v_{\perp} = \sqrt{\frac{\mu}{\rho}}$  rein transversale akustische Welle (Scherwelle)

- 14 -

\*  $v_{||}$  und  $v_{\perp}$  haben konstante und richtungsunabhängige Phasengeschwindigkeit

\*  $\mu > c \Rightarrow v_{\perp} > v_{||}$

\* Größenordnung von Schallgeschwindigkeit im Festkörper:  $1000 \frac{m}{s} - 10.000 \frac{m}{s}$

### 2.3.1 Gitterschwingungen - Phononen

$$\begin{aligned} M_1 \ddot{u}_n &= c \cdot (u_{n+1} + u_{n-1} - 2u_n) \\ M_2 \ddot{u}_{n+1} &= c \cdot (u_{n+2} + u_n - 2u_{n+1}) \end{aligned}$$

anwendbar, wenn akustische Wellenlänge bei genügend hoher Frequenz (z.B. durch thermische Wärmebewegung) mit dem Atomabstand vergleichbar ist.

mit:  $u$ : Auslenkung;  $c$ : Federkonstante;  $M_1 \neq M_2$ : Masse zweier Atomsorten

Lösung der DGL ( $\ddot{u} \rightarrow \omega$ ):

$$\omega^2 = c \cdot \left( \frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right) \pm c \cdot \sqrt{\left( \frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right)^2 - \frac{4 \sin^2(ka)}{M_1 \cdot M_2}}$$

$$\omega_1 = \sqrt{2c \cdot \left( \frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right)}$$

$$\omega_2 = ka \cdot \sqrt{\frac{2c}{M_1 + M_2}}$$

$\omega_1(k)$ : \* optischer Zweig  
\* Frequenz entspricht Schwingung im IR-Bereich

$\omega_2(k)$ : \* akustischer Zweig

$$E = \hbar \cdot \omega$$

$$\vec{p} = \hbar \cdot \vec{k}$$

$\vec{k}$ : Wellenvektor,  $\omega$ : Frequenz

## 2.4 Plastische Verformung

Versetzungsdichte:  $D_V = \frac{L}{V}$

$$D_V = \left[ \frac{cm}{cm^3} \right] = \left[ \frac{1}{cm^2} \right]$$

$L$ : Gesamtlänge der Versetzungslinien;  $V$ : Volumen

Größenordnung: \* in guten Halbleitern  $\approx 10^3 \text{ cm}^{-2}$

\* in Metallen  $\approx 10^7 - 10^9 \text{ cm}^{-2}$

## 2.4.1 Methoden zur Erhöhung der Festigkeit

- a) Korngrößeneffekt
- b) Verfestigung durch Kaltverformung
- c) Härtung durch Abschreckung
- d) Mischkristalhärtung
- e) Ausscheidungshärtung

## 3. Thermische Eigenschaften der Festkörper

### 3.1 Spezifische Wärme

spezifische Wärme: 
$$c = \frac{1}{m} \cdot C = \frac{1}{m} \cdot \frac{\Delta U}{\Delta T}$$

innere Energie eines Festkörpers:  $U = 3 N_A \cdot k_B T$ ; Wärmekapazität:  $C = \frac{\partial U}{\partial T} = 3 N_A k_B$

$$k_B \cdot \Theta = \hbar \omega_D \quad \Theta: \text{Debytemperatur [K]}$$

$\omega_D$ : Debyesche-Grenzfrequenz (= Kreisfrequenz der optischen Phononen)

### 3.2 Thermische Ausdehnung

thermischer Ausdehnungskoeffizient:  $\alpha = \frac{1}{l} \cdot \frac{\Delta l}{\Delta T} \text{ [K}^{-1}\text{]}$

Empirische Regel:  $\alpha \sim \frac{1}{T_S}$   $T_S$ : Schmelztemperatur

$$\frac{\Delta V}{V_0} = \beta \cdot \Delta T \quad \text{mit } \beta \approx 3\alpha$$

### 3.3 Wärmeleitfähigkeit

Wärmemenge pro Flächeneinheit (Querschnitt):  $\Delta Q = -\lambda \text{ grad } T \cdot \Delta t$

$\lambda$ : Wärmeleitfähigkeit  $\left[ \frac{\text{W}}{\text{K} \cdot \text{cm}} \right]$ , Wärmetransport vom heißen zum kalten Ende

$$\lambda = C \cdot \frac{\bar{v}^2}{3} \cdot \tau = \frac{1}{3} \cdot C \cdot \sqrt{v^2} \cdot l$$

Für Isolatoren erfolgt der Wärmetransport ausschließlich durch Phononen:

$$\lambda = \frac{1}{3} \cdot C_{ph} \cdot v \cdot l \quad v: \text{Schallgeschwindigkeit; } l: \text{freie Weglänge der Teilchen}$$

$C_{ph}$ : Wärmekapazität der Phononen pro Volumeneinheit  $= 3 N_A \cdot k_B$  mit  $N_A = \frac{\rho \cdot L}{m}$

Die Wärmeleitfähigkeit ist von der Kristallperfektion und Temperatur abhängig

⇒ gute Wärmeleiter, z. B.  $Al_2O_3$  müssen daher sehr rein sein.

Metalle sind i. a. sehr gute Wärmeleiter, da dem Wärmetransport der Phononen der Wärmetransport der Elektronen parallel geschaltet ist.

-16-

elektronische Wärmeleitfähigkeit:  $\lambda_{el} = \frac{1}{3} C_{el} \cdot v_{el} \cdot l_{el}$

### 3.4 Das freie Elektronengas (Fermigas), spezifische Wärme der Elektronen

Energieeigenwerte:  $E_{nml} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \cdot (n^2 + m^2 + l^2)$   $L$ : Kantenlänge; Größenordnung: cm

Zustandsdichte:  $D(E) = \frac{1}{V} \cdot \frac{dZ}{dE} = \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} \cdot \frac{1}{2\pi^2} \cdot \sqrt{E}$   $[cm^{-3}(eV)^{-1}]$

Elektronendichte:  $n = \int_0^{\infty} D(E) \cdot f(T, E) \cdot dE$   $T$ : Temperatur = [K]

Fermi-Verteilung:  $f(E, T) = \frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{k_B T}} + 1}$   $[cm^{-3}]$ ,  $k_B$ : Boltzmann-Konstante  
 $E_F$ : Fermienergie =  $k_B \cdot T$

Berechnung Dichte:  $\frac{N_A}{A_r} \cdot \rho = a \text{ Atome/cm}^3$   $\rho$ :  $\left[\frac{g}{cm^3}\right]$ ,  $A_r$ : Atomgewicht

$n = (\text{Anzahl Leitungs-Elektronen, die ein Atom abgibt}) \cdot a \text{ cm}^{-3}$

mit  $n = \int_0^{E_F} D(E) \cdot \underbrace{f(E, T)}_{=1} \cdot dE \Rightarrow n = \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} \cdot \frac{1}{2\pi^2} \cdot \frac{1}{\frac{3}{2}} \cdot E_F^{\frac{3}{2}}$

$E_F = \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \left(3\pi^2 \cdot n\right)^{\frac{2}{3}}$   $m$ : Elektronenmasse

Definitionen:

- \* Zustandsdichte ist die Anzahl der Zustände pro Volumen und Energie
- \* Elektronendichte ist die Gesamtzahl der vorhandenen Teilchen pro Volumeneinheit
- \* Fermi-Verteilung ist die Besetzungswahrscheinlichkeit der möglichen Zustände im thermodynamischen Gleichgewicht.



Wärmeleitfähigkeit für Phononen:  $\lambda = \frac{1}{3} \cdot C \cdot v \cdot l_{ph}$

mit:  $C$ : spezifische Wärmekapazität  $:= \frac{dU}{dT}$   $[C] = \frac{J}{K \cdot m^3}$ ,  $U$ : innere Energie  
 $v$ : Schallgeschwindigkeit  $:= \sqrt{\frac{E}{\rho}}$   $[C] = \frac{N}{m^2}$ ,  $[\rho] = \frac{kg}{m^3}$ ,  $[v] = \frac{m}{s}$   
 $l_{ph}$ : mittlere freie Weglänge der Phononen Federkonstante

Wärmeleitfähigkeit der Elektronen:  $\lambda_{el} = \frac{1}{3} C_{el} v_{el} l_{el}$

mit:  $C_{el} \approx 6 \cdot n \cdot k_B^2 \cdot \frac{T}{E_F}$ ,  $a$  gilt:  $\frac{k_B \cdot T}{E_F} \ll 1$

$v_{el} = v_F = \sqrt{\frac{2 E_F}{m}} = \frac{l_{el}}{\tau}$  (Fermigeschwindigkeit)

Wiedemann-Franz'sches-Gesetz:  $\lambda_{el} = \frac{1}{3} C_{el} \cdot v_{el} \cdot l_{el} = \frac{4 n k_B^2 T}{m} \cdot \tau$

mit  $v_{el} = v_F$  und  $l_{el} \approx \tau \cdot v_F$

$\frac{\lambda}{\sigma \cdot T} = L$   $L$ : Lorenzzahl  $:= \frac{\pi^2 \cdot k_B^2}{3 \cdot e^2} = 2,44 \cdot 10^{-8} \frac{V^2}{K^2}$

mit:  $\sigma$ : elektrische Leitfähigkeit der Leitungselektronen,  $\sigma = \frac{1}{\rho}$   
 $\rho$ : spezifischer Widerstand  $[ \Omega m ]$

spezifische Wärmekapazität:  $c = \frac{1}{m} \cdot C = \frac{1}{m} \cdot \frac{\Delta U}{\Delta T}$   $[c] = \frac{J}{kg \cdot K}$

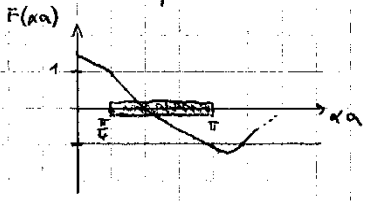
molare Wärmekapazität:  $C_m = \frac{1}{n} \cdot \frac{\Delta U}{\Delta T} = M \cdot c$   $[C_m] = \frac{J}{mol \cdot K}$ ;  $M = \frac{m}{n}$

4. Ladungstransport in Festkörpern

4.1 Elektronen im periodischen Gitterpotential

Bestimmung erlaubter Energiebereiche:  $P: \frac{1 - \cos \alpha \cdot a}{\alpha \cdot a} + \cos \alpha a = \cos ka$   
 $F(\alpha a)$

$P$ : Maß für die Barrierenhöhe, erlaubte Energiebereiche:  $-1 \leq F(\alpha a) \leq 1$



$P \rightarrow 0$ : Barriere verschwindet  $\Rightarrow$  freie Elektronen

$P \rightarrow \infty$ : unendlich hohe Barriere  $\Rightarrow$  diskrete Energiebereiche des unendlich hohen Potentialtopfes

## 4.2 Elektronische Bandstruktur und effektive Masse

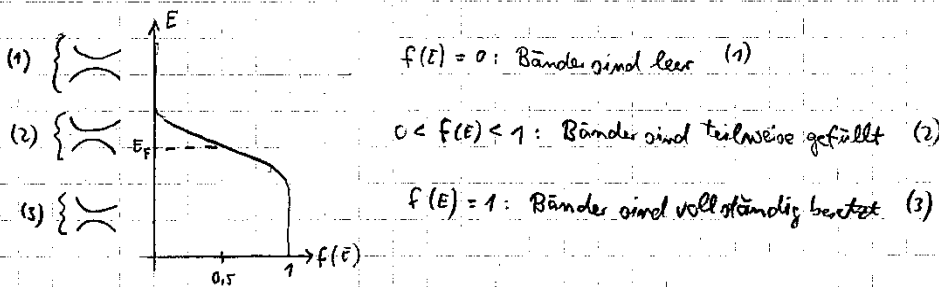
für freie Elektronen:  $E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$   $k$ : Wellenzahl

Gruppengeschwindigkeit:  $v_{gr} = \frac{d\omega}{dk} = \frac{1}{\hbar} \cdot \frac{dE(k)}{dk}$ ; für freie Teilchen:  $v_{gr} = \frac{\hbar}{m} \cdot k$

-18-

effektive Masse:  $m^* = \frac{\hbar}{\frac{d^2 E(k)}{dk^2}}$  berücksichtigt den Einfluß des Kristallgitters auf die Bewegung eines Teilchens im Potential  
 $m^*$  ist der Kehrwert der Krümmung der  $E(k)$ -Kurve

## 4.3 Metalle, Halbleiter und Isolatoren



Leere und vollständig gefüllte Energiebänder tragen nicht zur Leitfähigkeit bei

hoher Bandabstand  $E_g$  (z.B. Diamant:  $E_g \approx 5,5 \text{ eV}$ ): Isolator

$E_g \approx 1 \text{ eV}$  (z.B. Si, Ge): Halbleiter

$E_g \rightarrow 0$  bzw. bei Überlappung: Metalle

## 5. Elektrische Eigenschaften der Metalle, Supraleitung

### 5.1 Elektrische Leitfähigkeit der Metalle

Erlaubte Zustände der Elektronen befinden sich gleichmäßig verteilt im  $k$ -Raum in einer Kugel mit dem Radius:

$$k_F = \sqrt{\frac{2m E_F}{\hbar^2}}$$

Leitfähigkeit:  $\sigma = \frac{-e \cdot n \cdot \Delta p_x}{m^* \cdot E_x} = \frac{e^2 \cdot \tau}{m^*} \cdot n$  ( $n$  = Elektronendichte);  $\sigma: \left[ \frac{\text{S}}{\text{m}} \right]$

$\Delta p_x = -e E_x = \hbar \Delta k_x$  (Impulsänderung bei Anlegen eines Feldes in negativer  $x$ -Richtung an Fermikugel im Vergleich zum feldfreien Fall)

$\tau$ : Strenzzeit:  $\left. \begin{array}{l} \bullet \text{ Streuung an Gitterschwingung } (\sim 1/\tau_{ph}) \\ \bullet \text{ Streuung an Fremdatomen } (\sim 1/\tau_i) \end{array} \right\} \frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_{ph}} + \frac{1}{\tau_i}$

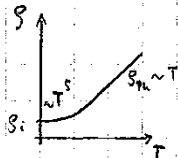
Spezifischer Widerstand:  $\rho = \rho_{\text{Pu}} + \rho_i$  (Matthiessen'sche Regel) ( $\rho = \frac{1}{\sigma}$ )

$$\rho_i = \rho_{20^\circ\text{C}} \left[ 1 + \alpha \cdot (T - 20^\circ\text{C}) \right] \quad \alpha: \text{Temperaturkoeffizient}$$

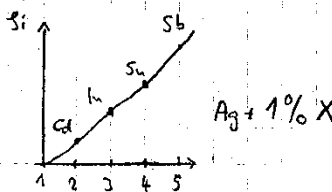
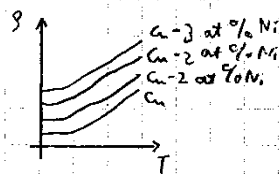
-19-

für tiefe Temperaturen:  $\rho \sim T^5$

• Restwiderstand  $\rho_i$ : Maß für Reinheit eines Metalls



•  $\rho_i$  steigt mit Verunreinigung



### 5.3 Widerstandswerkstoffe

1. Metalle mit hohem spezifischen Widerstand (z.B. Ta)
2. Metallegierungen (Ni/Cr, Fe/Cr/Al)
3. Halbleiter (Graphit, SiC)
4. Verbundwerkstoffe (z.B. Cr/SiO)

Forderungen an Präzisionswiderstände:

- Temperaturkoeffizient  $\alpha < 2 \cdot 10^{-5} \cdot ^\circ\text{C}^{-1}$
- Thermospannung gegenüber Cu  $< 10 \mu\text{V} \cdot ^\circ\text{C}^{-1}$
- hohe zeitliche Konstanz (rel. Änderung  $< 5 \cdot 10^{-5}$  pro Jahr)

Forderungen an Heizwiderstände (Heizleiter):

- hoher Schmelzpunkt
- chemische Beständigkeit
- Stabilität der Kristallstruktur
- ausreichende mechanische Wärmefestigkeit

Allgemein gilt: je größer  $\rho$  [ $\text{k}\Omega \cdot \text{cm}$ ], desto kleiner  $\alpha$  ( $10^{-3} \cdot ^\circ\text{C}^{-1}$ )

## 5.4 Kontaktsverkatoffe

Anforderungen:

- geringer Übergangswiderstand
- geringe Elektromigration
- Korrosionsbeständigkeit
- Verschleißfestigkeit

-20-

Das Kontaktpotential ist die Differenz der Austrittsarbeiten:  $E_c = \Phi_1 - \Phi_2 = U_{12} \cdot e$

Spannungsreihe: + Zn, Pb, Sn, Fe, Cu, Ag, Pt -

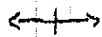
## 5.5 Elektrochemische Spannung, Korrosion

- positive Spannung: geringere Lösbarkeit als  $H^+$ -Ionen (edele Metalle)
  - negative Spannung: größere Lösbarkeit (unedele Metalle)
- } gegenüber  $H_2$ -Elektrone

Elektrochemische Spannungsreihe (Spannungen in V):

Au	Pt	Ag	Cu	$H_2$	Sn	Ni	Fe	Cr	Zn	Al
+1,5	+1,2	+0,8	+0,34	± 0	-0,14	-0,25	-0,44	-0,74	-0,76	-1,66

kathodisch (edel)



anodisch (unedel)

- Korrosionsbeständig sind nur folgende Edelmetalle: Au, Pt, Hg, Ag

## 5.6 Thermoelektrische Effekte

Seebeck-Koeffizient (auch Thermokraft):  $S = -\frac{e}{\sigma} \cdot \frac{d}{dT} (D_n \cdot n)$   $S: [V \cdot K^{-1}]$

mit  $D_n$ : Diffusionskoeffizient für Elektronen  $= v_x \cdot l_x = v_x^2 \cdot \tau$

$v_x$ : mittlere Geschwindigkeit,  $l_x$ : mittlere freie Weglänge

$$\Delta U = S \cdot \Delta T$$

$$U_{12} = (S_1 - S_2) \cdot \Delta T$$

$$S_1 - S_2 = S_{12}$$

Beim Peltier-Effekt wird ein aufgeprägter Strom benutzt, um Wärme zu transportieren

$$\text{Wärmestromdichte: } W = \Pi \cdot j \quad ; \quad W = (\Pi_1 - \Pi_2) \cdot j$$

mit  $\Pi$ : Peltier-Koeffizient,  $j$ : elektrische Stromdichte

-21-

$$\Pi = S \cdot T \quad S: \text{Seebeck-Koeffizient bzw. Thermokraft}$$

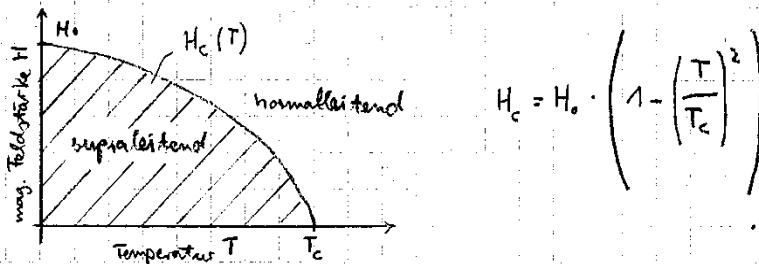
Anforderung für Peltierelemente und Thermoelemente zur Erzeugung elektr. Leistung:

- möglichst hohe Differenz der Thermokräfte  $|\Delta S|$
- gute elektrische Leitfähigkeit  $\sigma$
- möglichst geringe Wärmeleitfähigkeit  $\lambda$

$$\Rightarrow \text{Maß ihrer Eignung: Gütezahl } Z = |\Delta S|^2 \cdot \frac{\sigma}{\lambda} = \max.$$

## 5.7 Supraleitung

### 5.7.1 Phänomenologische Beschreibung der Supraleitung



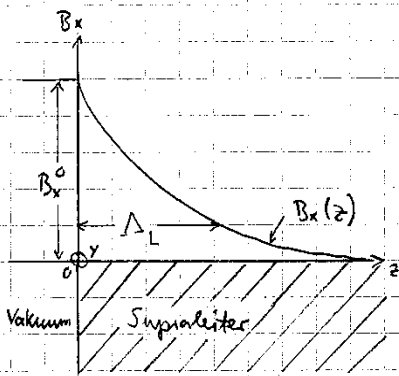
$T_c$ : Sprungtemperatur,  $H_c(T)$ : kritisches Magnetfeld

$$\vec{j}_s = \frac{n_s \cdot e^2}{m} \cdot \vec{E} \quad \text{rot } \vec{j}_s = -\frac{n_s \cdot e^2}{m} \vec{B} \quad (B(T=0)=0) \quad (\text{Index } s: \text{supraleitend})$$

$$\text{Rotation: } f: \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3: \text{rot } f = \nabla \times f = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_3}{\partial x_2} - \frac{\partial f_2}{\partial x_3} & \frac{\partial f_1}{\partial x_3} - \frac{\partial f_3}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2}{\partial x_1} - \frac{\partial f_1}{\partial x_2} \end{pmatrix}$$

$$\text{London-Gleichungen: } \vec{E} = \lambda_L \cdot \dot{\vec{j}}_s \quad \vec{B} = -\lambda_L \text{rot } \vec{j}_s \quad \text{mit } \lambda_L = \frac{m}{n_s \cdot e^2}$$

$$\text{Differentialgleichung: } \Delta \vec{B} - \frac{m_0}{\lambda_L} \cdot \vec{B} = 0$$



$$B_x(z) = B_x^0 e^{-\frac{z}{\Delta_L}}$$

$$\Delta_L = \sqrt{\frac{\lambda_L}{\mu_0}} = \sqrt{\frac{m}{\mu_0 n_s e^2}}$$

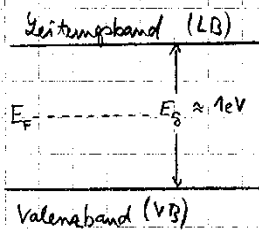
$B_x^0 := B_x$  an Stelle 0

$\Delta_L$ : London'sche Eindringtiefe

Größenordnung von  $\Delta_L$ : 10-100 nm

## 6. Halbleiter

### 6.1 Ladungsträgerdichten in intrinsischen Halbleitern (intrinsisch $\Leftrightarrow$ undotiert, eigenleitend)



Besetzungswahrscheinlichkeit (Fermi-Verteilung) für Elektronen / Löcher:

$$f(E, T) = \frac{1}{1 + e^{(E - E_F) / (k_B \cdot T)}} \quad f_h(E, T) = 1 - f(E, T)$$

Zustandsdichten:  $D_L(E) = M_L \cdot \frac{(2 m_h^*)^{3/2}}{2 \pi^2 \hbar^3} \sqrt{E - E_L} \quad (E > E_L)$

$$D_V(E) = \frac{(2 m_e^*)^{3/2}}{2 \pi^2 \hbar^3} \sqrt{E_V - E} \quad (E < E_V)$$

Elektronendichte:  $n = N_L^* \cdot e^{-\frac{E_L - E_F}{k_B \cdot T}}$

Löcherdichte:  $p = N_V^* \cdot e^{-\frac{E_F - E_V}{k_B \cdot T}}$

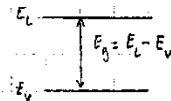
mit:  $N_L^* := 2 \cdot \frac{M_L}{\sqrt{2\pi}} \cdot \left[ \frac{m_h^* \cdot k_B \cdot T}{2 \pi \hbar^2} \right]^{3/2}$  und  $m_h^* = m_e^*$ : effektive Masse der Elektronen

$N_V^* := 2 \cdot \left[ \frac{m_p^* \cdot k_B \cdot T}{2 \pi \hbar^2} \right]^{3/2}$   $N_L^*, N_V^*$ : effektive Zustandsdichten  
 $m_p^* = m_h^*$ : effektive Masse der Löcher

intrinsische Halbleiter: Zahl der durch thermische Anregung entstandenen Elektronen ist gleich der Zahl der Löcher im Valenzband (Eigenleitung)

$$n_i = p_i = \sqrt{N_L^* \cdot N_V^*} \cdot e^{-\frac{E_g}{2 k_B \cdot T}}$$

$$E_F = \frac{E_V + E_L}{2} + \frac{k_B \cdot T}{2} \cdot \ln \frac{N_V^*}{N_L^*}$$



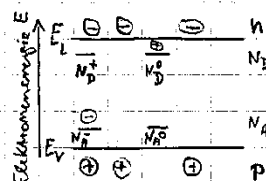
### 6.2 Dotierte Halbleiter

n-Dotierung, n-HL Donatoren (typ. 5wertig):  $N_D = N_D^+ + N_D^0$  (chemisch ionisiert / nicht ionisiert)

p-Dotierung, p-HL Akzeptoren (typ. 3wertig):  $N_A = N_A^- + N_A^0$

Aktivierungsenergien im Si: - Donator As:  $E_L - E_D = 49 \text{ meV}$

- Akzeptor B:  $E_A - E_V = 45 \text{ meV}$



## 6.2.1 Ladungsträgerkonzentration in dotierten Halbleitern

im thermodynamischen Gleichgewicht\* gilt:

$$n \cdot p = n_i^2 = N_L^* \cdot N_V^* \cdot e^{-\frac{E_g}{k_B T}}$$

- 23 -

\* es gilt: ortsunabhängige Temperatur, keine angelegten Felder, kein Nettostrom

Bsp.: Si @ 300K:  $n_i = p_i = 10^{10} \text{ cm}^{-3}$ ; n-Dotierung:  $n = 10^{16} \text{ cm}^{-3} \Rightarrow p = 10^4 \text{ cm}^{-3}$

Ladungsneutralität:

$$\underbrace{n + N_A^-}_{\ominus} = \underbrace{p + N_D^+}_{\oplus}$$

(wie bei intrinsischen Halbleitern)

$$\text{es gilt: } N_D^0 = N_D \cdot f(E_D, T) = N_D \cdot \frac{1}{1 + e^{(E_D - E_i)/(k_B T)}}, \quad N_D^+ = N_D \cdot [1 - f(E_D, T)]$$

( $N_A^0$  und  $N_A^-$  analog)

n-Dotierung:

$$n = \frac{2 \cdot N_D}{1 + \sqrt{1 + 4 \frac{N_D}{N_L^*} \cdot e^{-(E_L - E_D)/(k_B T)}}}$$

$$n \cdot p = n_i^2$$

Vereinfachungen:

\* niedrige Temperaturen:  $k_B \cdot T \ll E_L - E_D$  (Freeze-out-Bereich)

$$n = \sqrt{N_D \cdot N_L^*} \cdot e^{-\frac{(E_L - E_D)}{2 k_B T}}$$

$$E_F = \frac{E_L + E_D}{2} + \underbrace{k_B \cdot T \cdot \ln \sqrt{\frac{N_D}{N_L^*}}}_{\approx 0}$$

\* mittlere Temperaturen: (Sättigungsbereich)

$n \approx N_D = \text{const.}$  (alle Donatoren sind ionisiert, die Donatormasse ist erschöpft)

$$E_F = E_L + \underbrace{k_B \cdot T \cdot \ln \left( \frac{N_D}{N_L^*} \right)}_{< 0}$$

\* weitere Anhebung der Temperatur: (intrinsischer Bereich)

intrinsische Leitfähigkeit überwiegt; Berechnung des Fermi-niveaus wie im intrinsischen Fall

$$n = n_i + N_D^+ = \sqrt{N_L^* \cdot N_V^*} \exp\left(-\frac{E_g}{2 k_B T}\right) + N_D$$

### 6.3.1 Ladungsträgerbeweglichkeit ( $\mu$ )

Driftgeschwindigkeit:  $\vec{v} = \pm \mu \cdot \vec{E}$  (-: für Elektronen, +: für Löcher)

- 24 -

Beweglichkeit:  $\mu = \frac{e \cdot \tilde{\tau}}{m^*}$   $\tilde{\tau}$ : mittlere Zeit zwischen zwei Streuprozessen

Streuzeit für Streuungen an:

- ionisierten Störstellen:  $\tilde{\tau}_i \sim T^{3/2} / N_i$

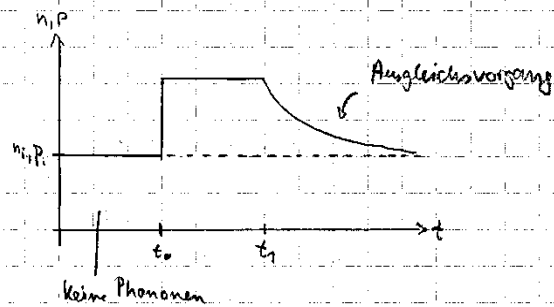
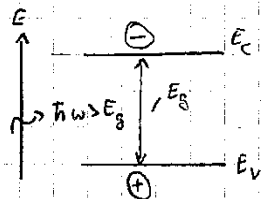
- Streuung an Gitterschwingungen (Phononen):  $\tilde{\tau}_{ph} \sim \frac{1}{T^{3/2}}$

Addition der Streuraten:  $\frac{1}{\tilde{\tau}_{ges}} = \frac{1}{\tilde{\tau}_i} + \frac{1}{\tilde{\tau}_{ph}}$  Dim:  $\left(\frac{cm^2}{Vs}\right)$

### 6.4 Ausgleichsvorgänge

#### 6.4.1 Ladungsträger-Lebensdauer

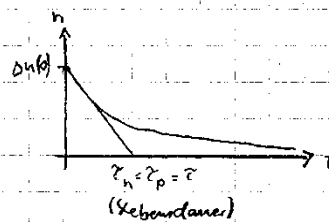
$$\frac{dn}{dt} = -\frac{n-n_0}{\tau_n}$$



$$\frac{d \Delta n}{dt} = -\frac{\Delta n}{\tau_n}$$

$$\Delta n = n - n_0$$

$$\Delta n(t) = \Delta n(t=0) \cdot e^{-\frac{t}{\tau_n}}$$



#### 6.4.2 Ausgleich der Minoritätsträgerdichte

n-Dotierung:  $n \approx N_D$   $p \approx \frac{n_i^2}{N_D} \ll n$

Rekombinationsrate:  $R = r(T) \cdot n \cdot p$  ( $n \cdot p = n_i^2$ )

Störung:  $\Delta p = p - p_0 = \frac{G_L}{N_D \cdot r(T)}$   $\frac{d \Delta p}{dt} = -\frac{\Delta p}{\tau_p}$

Zeitkonstanten:  $\tau_p = \frac{1}{r(T) \cdot N_D}$   $\tau_n = \frac{1}{r(T) \cdot N_A}$



### 6.4.3 Ausgleich der Majoritätsträgerdichte

Relaxationszeit:  $\tilde{\tau}_R = \frac{\epsilon}{\sigma}$  mit  $\epsilon = \epsilon_0 \cdot \epsilon_r$  dim:  $C V^{-1} m^{-1}$

$\sigma$ : Leitfähigkeit dim:  $S cm^{-1}$

$\epsilon_r$ : dim:  $S$

Raumladung:  $\rho = \text{div } \vec{D}$ ;  $\rho + \frac{\sigma}{\epsilon} \rho = 0$

typ. Rekombinationszeit: Elektronen-Hoch-Paare:  $10^{-3} \dots 10^{-9} s$

Majoritätsträger:  $10^{-12} \dots 10^{-15} s$

### 6.4.4 Ausdehnung der Störungen

Einstein-Beziehung:  $D_n = \frac{k_B \cdot T}{e} \mu_n$  bzw.  $D_p = \frac{k_B \cdot T}{e} \mu_p$

$D_n, D_p$ : Diffusionskonstanten der Elektronen bzw. Löcher

$$\frac{dp}{dt} = D_p \cdot \frac{d^2 p}{dx^2} - \frac{p - p_0}{\tilde{\tau}_p}$$

$$p(x) = [p(0) - p_0] e^{-\frac{x}{L_p}} + p_0$$

↳ gilt:  $\frac{dp}{dt} = 0$  im stationärem Fall

Diffusionslänge:  $L_p = \sqrt{D_p \cdot \tilde{\tau}_p}$  typ.:  $\mu m$ -Bereich

Def.: die Diffusionslänge ist die Strecke, die die Ladungsträger während ihrer Lebensdauer zurücklegen

Bei neutralen Abweichungen von den Gleichgewichtsdichten gilt:

$$L_{n/p} = \sqrt{D_{n/p} \cdot \tilde{\tau}_{n/p}} = \sqrt{V_x^2 \cdot \tilde{\tau}_{n/p}} \quad D_{n/p}: \text{siehe Einstein-Beziehung}$$

Debye-Länge bei n-Dotierung:  $L_D = \sqrt{D \cdot \tilde{\tau}_R} = \sqrt{\frac{k_B \cdot T}{e} \cdot \mu_n \cdot \frac{\epsilon}{\sigma}} = \sqrt{\frac{k_B \cdot T}{e^2} \cdot \frac{\epsilon}{N_D}}$  typ.:  $< 50 nm$

wg. n-Dotierung gilt:  $\sigma = n \cdot e \cdot \mu_n$  und  $n = N_D$

analog bei p-Dotierung:  $\sigma = p \cdot e \cdot \mu_p$  und  $p = N_A \Rightarrow L_p = \sqrt{\frac{k_B \cdot T}{e^2} \cdot \frac{\epsilon}{N_A}}$

die Debye-Länge ist charakteristisch für die Ausdehnung von Raumladungszonen (Störung der Neutralität) an den Dotierungsübergängen (Inhomogenitäten).

## 7. Dielektrische Eigenschaften von Festkörpern

### 7.1 Verallgemeinerte Permittivität

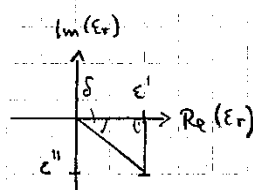
elektrische Flussdichte (dielektrische Verschiebung):  $\vec{D} = \underbrace{\epsilon_0 \cdot \epsilon_r}_{\epsilon} = \epsilon_0 \vec{E} + \vec{P} = \epsilon_0 \underbrace{(1 + \chi)}_{\epsilon_r} \vec{E}$  -26-

Polarisation:  $\vec{P} = \epsilon_0 \chi \vec{E}$  mit  $\chi = \epsilon_r - 1$

komplexe relative Permeabilität:  $\underline{\epsilon_r} = \epsilon' - j\epsilon''$

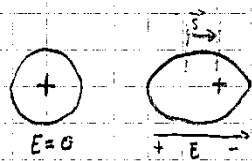
$\epsilon''$ : in-Phase-Komponente der Stromdichte  $\vec{j}$ :

$$\vec{j} = \frac{d\vec{D}}{dt} = j\omega \epsilon_0 \underline{\epsilon_r} \vec{E} = \underbrace{j\omega \epsilon_0 \epsilon'}_{\text{Blindleistung}} \vec{E} + \underbrace{\omega \epsilon_0 \epsilon''}_{\text{Verlustleistung}} \vec{E}$$



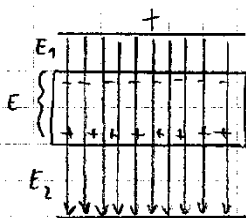
Verlustfaktor:  $\tan \delta = \frac{\epsilon''}{\epsilon'}$   $\epsilon_r = |\underline{\epsilon_r}| \cdot e^{-j\delta}$

### 7.2 Polarisierbarkeit und lokales elektrisches Feld



Dipolmoment:  $\vec{p} = \vec{s} \cdot q = \epsilon_0 \cdot \alpha \vec{E}_a$

$\vec{s}$ : Strecke, um den sich negative Elektronenhülle und positiver Kern gegeneinander verschieben.  
 $q$ : positive Ladung auf dem Kern



$\vec{D} = \epsilon_0 (1 + \chi \vec{E}) = \text{const.}$

$\chi \cdot \vec{E} = \text{const.}$

Polarisation eines Mediums:  $\vec{P} = \epsilon_0 \cdot N \cdot \alpha \cdot \vec{E}_a = \epsilon_0 \chi \vec{E}_a \Leftrightarrow \boxed{\chi = N \cdot \alpha = \epsilon_r - 1}$

mit  $N$ : Dichte der Atome pro Volumeneinheit

$\alpha$ : Polarisierbarkeit des Mediums :=  $4\pi \cdot R^3$  ( $R$ : Atomradius)

$\vec{E}_a$ : äußeres angelegtes Feld

mikroskopisch:  $\alpha \Leftrightarrow$  makroskopisch:  $\epsilon_r$

Clausius-Moretti-Gleichung:  $\frac{\alpha \cdot N}{3} = \frac{\epsilon_r - 1}{\epsilon_r + 2} \Rightarrow \epsilon_r = 1 + \frac{\alpha N}{1 - \frac{\alpha N}{3}}$

Falls  $\frac{\alpha \cdot N}{3} > 1 \Rightarrow$  spontane Polarisation (elektr. Feld nicht erforderlich)

### 7.3 Elektrische Polarisation im mikroskopischen Bild

(quasistatische Polarisation bei niedrigen Frequenzen)

#### 7.3.1 Elektrische Polarisation

$$N \cdot \alpha = \frac{\pi}{2}, \quad \boxed{E_v \approx 4}$$

#### 7.3.2 Ionische Polarisation

bei Frequenzen unterhalb der Eigenresonanz<sup>\*)</sup> eines Gitters gilt:

$$\alpha = \frac{q^2}{2c\epsilon_0}$$

<sup>\*)</sup> liegt bei  $10^{13}$  Hz (im infraroten Spektralbereich);  $c$ : Federkonstante

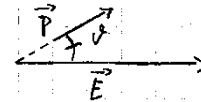
#### 7.3.3 Orientierungspolarisation

Energie eines Dipols mit Dipolmoment im elektrischen Feld:

$$\vec{U} = -\vec{p} \cdot \vec{E} \quad \text{bzw.} \quad U = -p \cdot |\vec{E}| \cdot \cos \vartheta$$

$$\text{Abodhätzung: } \alpha \approx \frac{p \cdot \overline{\cos \vartheta}}{\epsilon_0 \cdot |\vec{E}|} = \frac{p^2}{3k_B T \epsilon_0}$$

$$\alpha \sim \frac{1}{T}$$



$$\text{es gilt: } \overline{\cos \vartheta} = \coth \nu = \frac{1}{\nu} \quad \text{mit} \quad \nu = \frac{p \cdot |\vec{E}|}{k_B \cdot T} \ll 1$$

### 7.4 Frequenzabhängigkeit der Polarisation

#### 7.4.1 Elektrische und ionische Polarisation

niedrige Frequenzen: quasistatische Polarisation  $\Rightarrow$  Vernachlässigung von

- Trägheit der Elektronenhülle bzw. der Ionen
- Dipolschwingung verbundenen Abstrahlungsverluste

höhere Frequenzen: für Dipol wird ein gedämpfter Oszillator angesetzt, der durch das Wechselfeld zu erzwungenem

$$\text{komplexe Polarisierbarkeit: } \alpha(\omega) = \alpha(\omega=0) \cdot \frac{\omega_0^2}{\omega_0^2 - \omega^2 + j\gamma \cdot \omega}$$

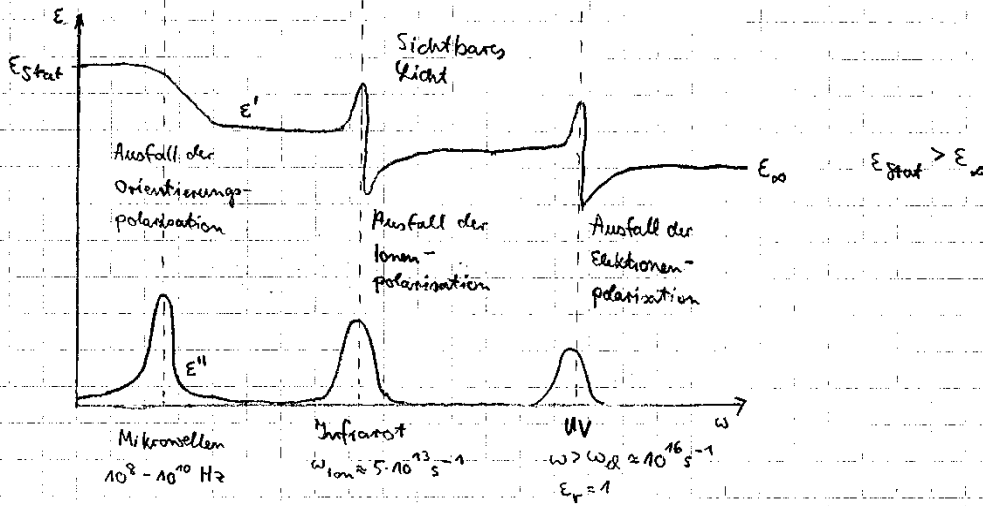
Frequenzgang :=  $\frac{\hat{x}(\omega)}{\hat{x}(0)}$

mit:  $\omega_0$ : Eigenresonanzfrequenz

$\gamma$ : entspricht Dämpfung durch Abstrahlungsverluste

Die Resonanzfrequenz der elektronischen Polarisierbarkeit liegt im ultravioletten Spektralbereich  
 $\omega_{el} \approx 10^{16} \text{ s}^{-1}$

### 7.4.2 Dynamik der Orientierungspolarisation



$$\epsilon'(\omega) = \epsilon_{\infty} + \frac{\epsilon_{stat} - \epsilon_{\infty}}{1 + \omega^2 \tau^2}$$

$$\epsilon''(\omega) = \frac{\epsilon_{stat} - \epsilon_{\infty}}{1 + \omega^2 \tau^2} \cdot \omega \tau$$

$$\epsilon''(\omega) \approx \chi_{Dipol}''(\omega)$$

mit:  $\epsilon_{\infty} = \chi_{ion}(0) + \chi_{el}(0) + 1$  und  $\epsilon_{stat} = \epsilon'(0) = \epsilon_{\infty} + \chi_{Dipol}(0) = \epsilon_r(0)$

### 7.4.3 Verluste durch Restleitwert

Die Leitfähigkeit entspricht frequenzabhängigen Imaginärteil der relativen Permittivität

$$\epsilon'' = \frac{\sigma}{\omega \cdot \epsilon_0}, \text{ der bei niedrigen Frequenzen stark zunimmt.}$$

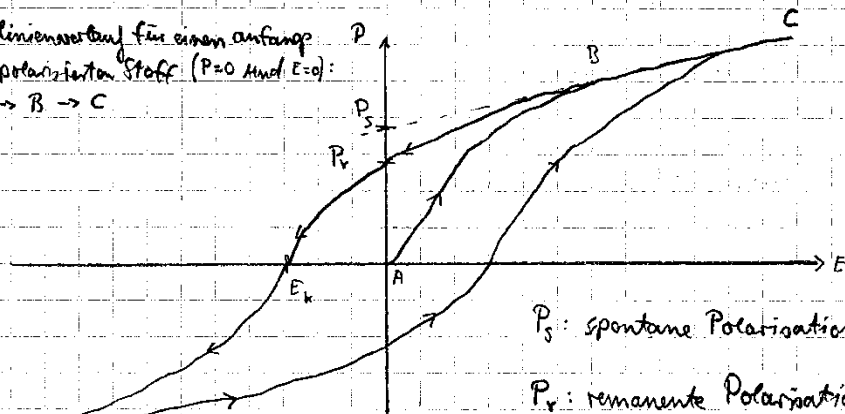
Grenzfrequenz:  $\omega_g = \frac{\sigma}{\epsilon}$   $\omega < \omega_g$ : Quasileiter,  $\omega > \omega_g$ : Quasi-Dielektrikum

### 7.5 Ferroelektrizität

Ferroelektrizität tritt nur bei der Temperatur  $T$  eines Stoffes unterhalb der ferroelektrischen

Grenztemperatur  $T_c$  ( $T < T_c$ ) auf:

Kennlinienverlauf für einen anfangs nicht polarisierten Stoff ( $P=0$  und  $E=0$ ):  
 $A \rightarrow B \rightarrow C$



$P_s$ : spontane Polarisation

$P_r$ : remanente Polarisation

$E_k$ : Koerzitivfeld

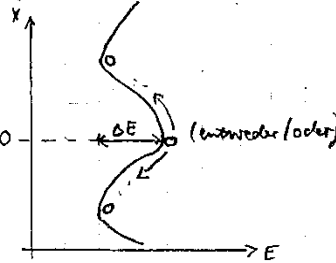
Für  $T_c > T$  tritt keine Ferroelektrizität auf. Es gilt das Curie-Weiss-Gesetz:

$$\chi = \frac{C}{T - \theta} \quad \text{mit } \theta \approx T_c; \quad C: \text{Curie-Konstante}; \quad \boxed{\text{keine spontane Polarisation } P_s}$$

-29-

Ferroelektrizität tritt dann auf, wenn ein spontanes Dipolmoment durch den Kristallaufbau bedingt ist.

BaTiO<sub>3</sub> im ferroelektrischen Zustand; metastabil



$$\Delta E < k_B \cdot T \\ \Rightarrow T_c \approx \frac{E}{k_B}$$

- Voraussetzung:
- 1) Dipole im Kristall vorhanden
  - 2) Wechselwirkung zwischen elementaren Dipolen groß genug

Der Verlustwinkel  $\tan \delta$  liegt im Bereich  $10^{-2} \dots 10^{-1}$ , der Frequenzbereich zum Einsatz von Ferroelektrika liegt unterhalb von 100 MHz

### 7.6 Piezoelektrizität

$$\vec{D} = \epsilon_0 \epsilon_r \vec{E} + \underline{\underline{e_p}} \underline{\underline{\epsilon}} \quad \underline{\underline{e_p}}: \text{piezoelektrischer Tensor}, \quad \underline{\underline{\epsilon}} = \frac{\Delta l}{l} \quad (\text{Dehnung})$$

$$\underline{\underline{\sigma}} = \underline{\underline{c}} \underline{\underline{\epsilon}} + \underline{\underline{e_p}} \vec{E} \quad \underline{\underline{c}}: \text{mechanischer Elastizitätstensor}$$

Im eindimensionalen Fall:

$$D_x = \epsilon_0 \epsilon_r E_x - k_B \cdot \frac{\Delta l}{l} \quad \left( \frac{\Delta l}{l} = \epsilon \right)$$

$$\sigma_{xx} = c \cdot \frac{\Delta l}{l} + k_0 \cdot E_x$$

Elektrostriktion:  $\frac{\Delta l}{l} = k_E \cdot |\vec{E}|^2$  (kommt durch Polarisation eines angelegten Feldes zustande)

### 7.7 Pyroelektrizität

Materialien: z.B. Turmalin (B- und F-haltiges Silikat)

Änderung der spontanen elektrischen Polarisation:  $\Delta P = \lambda \cdot \Delta T$

$\lambda$ : pyroelektrischer Koeffizient; Größenordnung:  $\lambda \approx 10^{-8} \frac{As}{cm^2 K}$

## 7.8 Optische Eigenschaften

Die Ausbreitung einer elektromagnetischen Welle erfolgt mit der Phasengeschwindigkeit

$$v_{\text{Ph}} = \frac{1}{\sqrt{\epsilon \mu}} = c \cdot \frac{1}{\sqrt{\epsilon_r}} \quad c: \text{Lichtgeschwindigkeit}$$

- 30 -

Brechungsindex:  $n = \sqrt{\epsilon_r}$

komplexer Fall:  $\epsilon_r = \epsilon' - j\epsilon'' \Rightarrow n = n' - jn''$

$$\boxed{n'^2 - n''^2 = \epsilon'} \quad \boxed{2n'n'' = \epsilon''}$$

$n''$  ist mit dem in der Optik gebräuchlichen Dämpfungskonstanten  $K$

## 8. Magnetische Eigenschaften von Festkörpern

Einheit:  $\left[ \frac{Vs}{m} \right]$

magnetische Flussdichte / magnetische Induktion:  $\vec{B} = \mu_r \cdot \mu_0 \cdot \vec{H} = \mu_0 \vec{H} + \vec{J} = \mu_0 (\vec{H} + \vec{M})$

mit:  $\vec{H}$ : magnetische Feldstärke / magnetische Erregung, Einheit:  $\left[ \frac{A}{m} \right]$

$\vec{J}$ : magnetische Polarisation

$\vec{M}$ : Magnetisierung

$\mu_0$ : magnetische Feldkonstante / Induktionskonstante:  $\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7} \frac{Vs}{Am}$

magnetische Suszeptibilität:  $\chi^m = \mu_r - 1 = \frac{1}{\mu_0} \cdot \frac{J}{H} = \frac{M}{H}$

Diamagnetismus: ( $\mu_r < 1$  und  $\chi^m < 0$ )

- durch äußeres Magnetfeld induziert
- tritt in allen Atomen auf

Paramagnetismus: ( $\mu_r > 1$  und  $\chi^m > 0$ )

- Ausrichtung permanenter magnetischer Dipole im äußeren Magnetfeld
- ohne Feld ist die Orientierung der Dipole durch Temperaturbewegung statistisch verteilt
- tritt nur auf, sofern Atome bzw. Moleküle magnetisches Dipolmoment haben.

Ferromagnetismus: ( $\mu_r \gg 1$  und  $\chi^m \gg 1$ )

- Ausrichtung Dipole: ↑↑↑↑ (parallel)
- tritt nur in Kristallen auf

Antiferromagnetismus:

- Dipolausrichtung:  $\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow$
- im feldfreien Raum: Gesamtpolarisation = 0

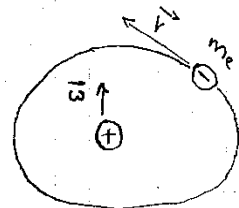
-37

Ferrimagnetismus:

- Dipolausrichtung:  $\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow$  bzw.  $\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow$
- Spontane Polarisation  $\neq 0$

### 8.1 Elementare magnetische Dipolmomente

(mechanischer) Drehimpuls:  $\vec{L} = \vec{r} \times m_e \cdot \vec{v} = m_e r^2 \vec{\omega}$



magn. Moment:  $\vec{m} = I \cdot \vec{A} = -e \frac{\vec{\omega}}{2\pi} \cdot \pi r^2 = -\frac{e}{2m_e} \cdot \vec{L}$

permanentes magnetisches Dipolmoment:  $M_2 = g \cdot (-\mu_B) \cdot J$   $\mu_B = \frac{e \cdot \hbar}{2m_e} \approx 9,27 \cdot 10^{-24} \text{ Am}^2$

mit  $J$ : Gesamtdrehimpuls eines Atoms (jeweils die z-Komponente) :=  $L + S$   
(Spin- und Bahnbewegung)

gyromagnetisches Verhältnis:  $g = 1 + \frac{J \cdot (J+1) + S \cdot (S+1) - L \cdot (L+1)}{2 J \cdot (J+1)}$

nur Bahndrehimpuls:  $S=0 \rightarrow J=L \rightarrow g=1$

kein Bahndrehimpuls (nur Spin):  $L=0 \rightarrow J=S \rightarrow g=2$

$T_1$	$Mn$	$Fe$	aufgeprägte Elektromagnetismus $\leftrightarrow$ Spinnmoment maximal, d.h. bei halbvollen Schalen
$3d^2$	$3d^5$	$3d^6$	
$\uparrow\uparrow$	$\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow$	$\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow$	
$2\mu_B$	$5\mu_B$	$4\mu_B$	

es gilt:  $|\vec{J}| = \hbar \cdot \sqrt{J \cdot (J+1)}$

$|\vec{M}| = g \cdot \mu_B \cdot \frac{|\vec{J}|}{\hbar}$

## 8.2 Diamagnetismus ( $\mu_r < 1$ ; $\chi^m < 0$ )

Larmorfrequenz:  $\omega_L = \frac{e \cdot B}{2 m_e}$

induzierter Drehimpuls:  $\vec{L}_{\text{dia}} = m_e r^2 \cdot \vec{\omega}_L$

zeigt in Richtung des äußeren H-Feld

-32-

diamagnetische Suszeptibilität:

$$\chi_{\text{dia}}^m = -\frac{N}{6 m_e} \cdot Z^* \cdot e^2 \cdot \overline{r^2} \cdot \mu_0 \quad (\text{trifft immer auf})$$

mit  $N$ : Atomdichte

$Z^*$ : effektive Kernladungszahl

$\chi_{\text{dia}}^m$  ist temperaturunabhängig!

## 8.3 Paramagnetismus ( $\mu_r > 1$ ; $\chi^m > 0$ )

magnetisches Dipolmoment:  $M_z = -g \cdot \mu_B \cdot M$  mit  $-J \leq M \leq J$

$J$ : Gesamtdrehimpuls

Energie des magn. Dipols  $\vec{M}_D$  in einem äußeren Feld  $\vec{H}$ :

$$\vec{E}_M = -\mu_0 \vec{H} \cdot \vec{M}_D = +\mu_0 H \cdot M \cdot g \cdot \mu_B$$

paramagnetische Suszeptibilität:

$$\chi_{\text{para}}^m = \frac{C}{T} \quad \text{mit} \quad C = \frac{N \cdot \mu_0 \cdot g^2 \cdot J(J+1) \cdot \mu_B^2}{3 k_B}$$

(Voraussetzung: Atome bzw. Moleküle müssen magnetisches Dipolmoment haben)

$\chi_{\text{para}}^m$  besitzt ausgeprägte Temperaturabhängigkeit!

## 8.4 Leitungselektronen

Magnetisierung:  $M_{\text{para}} = 2 \cdot \mu_B \cdot B \cdot \frac{1}{2} D(E_F) \cdot \mu_B$  (Voraussetzung:  $\mu_B \cdot B \ll E_F$ )

paramagn. Suszeptibilität:  $\chi_{\text{para}}^m = \frac{M_{\text{para}}}{H} = \mu_0 \mu_B^2 \cdot D(E_F)$

mit:  $D(E_F) = \frac{3n}{2k_B T_F}$

diamagnetische Suszeptibilität:  $\chi_{\text{dia}}^m = -\frac{1}{3} \chi_{\text{para}}^m$  (temperaturunabhängig wg.  $T_F \gg T$   
[Pauli-Spin-Paramagnetismus])

Leitungselektronen haben insgesamt ein (schwaches) paramagnetisches Verhalten:

$$\chi^m = \frac{2}{3} \chi_{\text{para}}^m = \mu_0 \mu_B^2 \cdot \frac{n}{k_B T_F}$$

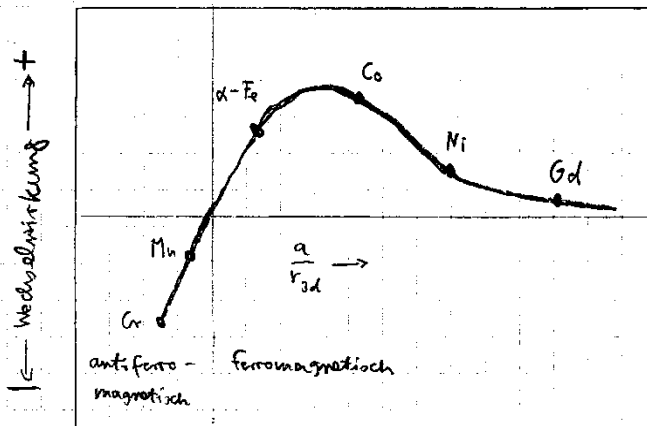


## 8.5 Ferromagnetismus ( $\mu_r \gg 1$ )

Def.: Wechselschwingungsenergie bzw. Austauschenergie  $E_A$  ist die Energie, die aufgebracht werden muß, um die Ausrichtung der Dipole der spontanen Polarisation aufzuheben.

$$E_A \begin{cases} < 0 : \text{parallele Ausrichtung} \\ > 0 : \text{antiparallele Ausrichtung} \end{cases}$$

Austausch-Wechselschwingung in Abhängigkeit vom Atomabstand:



### 8.5.2 Ferrimagnetismus

Ferrimagnetische Substanzen technisch von Bedeutung wg:

- a, hohe Magnetisierung
- b, zugleich schlechte Leiter

Ferrimagnetika haben zwei Untergitter mit entgegengesetzt ausgerichteten Spins. Anders als bei den Antiferromagnetikern, wo beide Untergitter gleich viele Atome mit gleichem magn. Dipolmoment haben, sind bei den Ferrimagnetikern entweder Zahl und/oder Betrag der magn. Momente beider Untergitter unterschiedlich.

Beispiel: Ferrite  $\text{MeO} \cdot \text{Fe}_2\text{O}_3$  mit Spinell-Kristallstruktur (Summenformel  $\text{AB}_2\text{O}_4$ )  
zweiwertig      dreiwertig

Bei zunehmender Temperatur bleibt die spontane Polarisation durch gegenseitige Ausrichtung (parallel zu antiparallel) nur solange aufrechterhalten, bis die thermische Energie der Gitterschwingungen die Austauschenergie übersteigt. Oberhalb dieser Grenztemperatur (Curie-Temperatur  $T_C$ , bei Antiferromagnetikern Neel-Temperatur  $T_N$ ) tritt eine Phasenumwandlung zu einem paramagn. Verhalten auf.

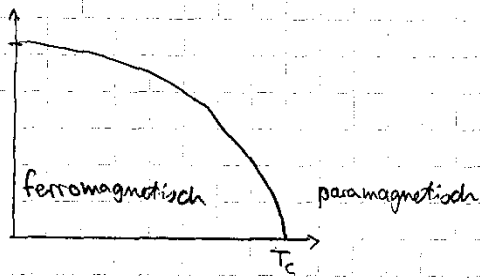
es gilt das Curie-Gesetz:

$$\chi = \frac{C}{T - \theta}$$

$\theta$ : paramagnetische Curie-Temperatur;  
 $C$ : siehe FS S. 32

Sättigungsmagnetisierung  $M_S$

Phasenverlauf eines ferromagnetischen Stoffes



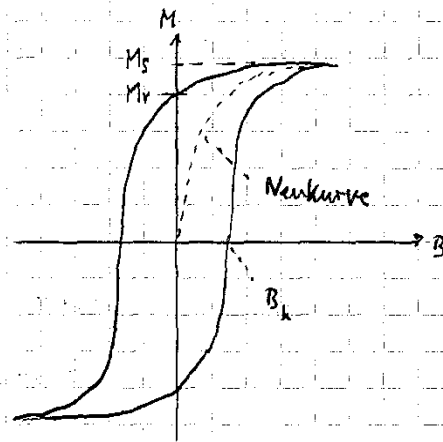
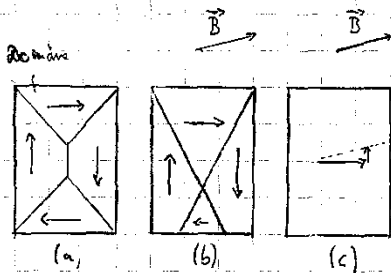
-34-

### 8.5.3 Ferromagnetismus: Makroskopische Erscheinungsform

Kennzeichen von Ferromagnetika ist eine spontane Magnetisierung auch ohne äußeres Feld, die unterhalb der Curie Temperatur  $T_C$  ( $Co = 1130^\circ C$ ,  $Fe = 770^\circ C$ ) auftritt.

meßbare Suszeptibilität:  $\chi^m = \frac{M}{H}$  (richtungabhängig, solange Sättigungsmagnetisierung nicht erreicht)

### 8.5.5 Magnetisierungskurven von ferromagnetischen Kristallen



Magnetisierungskurve

#### 1. Wandverschiebung (bei kleinen Feldern):

Domänen, deren Magnetisierung günstig liegt, wachsen auf Kosten anderer Domänen (vgl. (a)  $\rightarrow$  (b)  $\rightarrow$  (c)).

#### 2. Drehung der Magnetisierung (bei hohen Feldern):

Die Magnetisierung des Festkörpers, der durch Wandverschiebung zu einer Domäne wurde, wird in Feldrichtung gedreht (gestrichelte Linie), dabei wird die Anisotropieenergie aufgebracht (vgl. (c)).

komplexe Permeabilität:  $\mu = \mu' - j\mu''$   $\mu'' \hat{=}$  Verluste ;  $\mu' > 0$

### 8.5.6 Spezielle Werkstoffe und deren Anwendungen

	Fe	Ni	Co
Kristallstruktur	krz	kfz	hexagonal
Sättigungspolarisation	2,18 T	0,64 T	1,81 T
$T_c$	770°C	358°C	1130°C
Beste Richtung	$\langle 100 \rangle$	$\langle 111 \rangle$	$\langle 001 \rangle$

Anwendung	Anforderungen	Material
Transformatoren, Motoren, Generatoren	$\gamma_s$ hoch $H_k$ gering $\sigma$ gering	Fe + Si (0,7 - 4%) Fe + Co (30 - 50%)
Niederfrequenz-Übertrager	lineare B-H-Kennlinie $\sigma$ gering	Fe + 36% Ni Fe <sub>0,2</sub> Ni <sub>0,4</sub> Co <sub>0,4</sub>
Hochfrequenz-Übertrager	wie NF-Übertrager, jedoch $\sigma \rightarrow 0$	Ni-Zn Ferrite
Abschirmungen	hohe Anfangspermeabilität $\mu_r$	$\mu$ -Metall Fe + 76-79% Ni + Cu, Cr, Mo
Digitale Informationsspeicher	rechteckige B-H bzw. M-H-Kennlinie $\gamma_s \approx B_r$	Fe + 50% Ni MgMn-Ferrite
Dauermagnete	große Hystereseschleife großes B-H-Produkt	Fe <sub>0,5</sub> Co <sub>0,24</sub> Ni <sub>0,14</sub> Al <sub>0,09</sub> Cu <sub>0,3</sub> Sm Co <sub>5</sub> BaO · 6 Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub>

•  $\gamma_s$ : Sättigungspolarisation

• Neomagnetische Werkstoffe = kleine Koerzitivfeldstärken ( $H_k$ ), schmale Hystereseschleifen