

---

# Festkörper

---

Herausgeber Rainer Kassing

Autoren

Stefan Blügel, Margret Giesen, Burkard Hillebrands  
Hartmut Hillmer, Harald Ibach, Rainer Kassing  
Hilbert v. Löhneysen, Peter Luger, Josef Salbeck  
Udo Scherz, Werner Schilling, Ludwig K. Thomas

Unter Mitwirkung von Paul Fumagalli

2., überarbeitete Auflage



Walter de Gruyter  
Berlin · New York 2005

# Inhalt

## 1 Grundlagen der Festkörperphysik

*Udo Scherz*

1.1	Bindungen im Festkörper	3
1.1.1	Valenzkristalle	3
1.1.2	Metalle	5
1.1.3	Ionenkristalle	6
1.1.4	Molekülkristalle und Polymere	7
1.1.5	Amorphe Festkörper, Gläser und Keramiken	8
1.1.6	Biologische Festkörper	10
1.1.7	Züchtung von Halbleiterkristallen	11
1.1.8	Nanostrukturen	16
1.2	Mechanische Eigenschaften	18
1.2.1	Elastische Konstanten	18
1.2.2	Gitterschwingungen	20
1.3	Thermische Eigenschaften	40
1.3.1	Wärmekapazität	41
1.3.2	Thermische Ausdehnung	43
1.3.3	Wärmeleitung	44
1.4	Bändermodell	46
1.4.1	Elektronengas	52
1.4.2	Bestimmung der Energiebänder	54
1.4.3	Grundzustandseigenschaften	59
1.5	Elektrische Eigenschaften	65
1.5.1	Effektive Masse der Kristallelektronen	66
1.5.2	Elektrische Leitfähigkeit	73
1.5.3	Bilanzgleichungen	79
1.6	Optische Eigenschaften	82
1.7	Gestörte Halbleiter	91
1.7.1	Donatoren, Akzeptoren	92
1.7.2	Flache Störstellen	94
1.7.3	Oberflächen, Grenzflächen	95
1.7.4	Heterostrukturen	98
1.8	Tiefe Zentren in Halbleitern und Isolatoren	100
1.8.1	Farbzentren	101
1.8.2	Experimentelle Methoden	104
1.8.3	Spezielle Zentren	108

## 2 Kristallstrukturen

*Peter Luger*

2.1	Grundlagen .....	111
2.1.1	Geschichtlicher Überblick .....	111
2.1.2	Periodizität, Kristallgitter, Gitterkonstanten .....	114
2.1.3	Netzebenen, reziprokes Gitter .....	116
2.2	Kristallsymmetrie .....	118
2.2.1	Punktgruppensymmetrioperationen, Kristallklassen .....	118
2.2.2	Translationssymmetrie, Bravais-Gitter, Raumgruppen .....	124
2.2.3	Strukturtypen .....	128
2.2.4	Polymorphie .....	138
2.3	Kristallstrukturbestimmung mit Beugungsmethoden .....	140
2.3.1	Röntgen/Neutronenbeugung an Kristallen (Ergebnisse der Beugungstheorie) .....	140
2.3.2	Experimentelle Grundlagen der Röntgenbeugung .....	156
2.3.3	Pulverdiffraktometrie .....	159
2.3.4	Beugungsexperimente an Einkristallen .....	164
2.3.5	Lösung des Phasenproblems .....	174
2.3.6	Gang einer Strukturbestimmung .....	184
2.4	Anwendungen der Kristallstrukturanalyse .....	187
2.4.1	Kleine Moleküle .....	187
2.4.2	Strukturanalyse bei tiefen Temperaturen .....	193
2.4.3	Elektronendichte und topologische Analyse .....	198
2.4.4	Makromoleküle (Proteine, Virusstrukturen) .....	204

## 3 Fehlordnung in Kristallen

*Werner Schilling*

3.1	Einführung .....	219
3.2	Atomare Fehlstellen .....	222
3.2.1	Einteilung und Notation atomarer Fehlstellen .....	222
3.2.2	Beispiele für atomare Fehlstellenstrukturen .....	223
3.2.3	Strukturbestimmung atomarer Fehlstellen .....	226
3.3	Thermische Fehlordnung .....	228
3.3.1	Fehlstellengleichgewichte in einatomaren Substanzen .....	228
3.3.2	Methoden zum Nachweis thermischer Leerstellen .....	231
3.3.3	Fehlstellengleichgewichte in nichtatomaren Substanzen .....	234
3.4	Platzwechsel atomarer Fehlstellen .....	236
3.4.1	Platzwechsel von Leerstellen .....	236
3.4.2	Platzwechsel von Zwischengitteratomen .....	238
3.5	Festkörperdiffusion .....	241
3.5.1	Diffusionsgleichungen, Diffusionskoeffizienten .....	241
3.5.2	Driftdiffusion .....	245
3.5.3	Selbstdiffusion und Korrelationsfaktor .....	247
3.5.4	Fremdatomdiffusion .....	250
3.5.5	Diffusion in konzentrierten Legierungen .....	254

3.6	Bestrahlungsinduzierte Fehlstellen .....	257
3.6.1	Der Verlagerungsprozess .....	257
3.6.2	Reaktionen bestrahlungsinduzierter Fehlstellen .....	261
3.7	Versetzungen .....	264
3.7.1	Topologische Eigenschaften von Versetzungen .....	264
3.7.2	Verzerrungsfelder um Versetzungen .....	267
3.7.3	Beobachtung von Versetzungen im Elektronenmikroskop .....	270
3.7.4	Atomistische Struktur des Versetzungskerns .....	274
3.8	Innere Grenzflächen .....	279
3.8.1	Topologische Eigenschaften, Grenzflächenenergien .....	279
3.8.2	Atomistische Strukturen in Krongrenzen .....	284

## 4 Oberflächen

*Margret Giesen, Harald Ibach*

4.1	Einleitung .....	291
4.2	Struktur von Oberflächen .....	292
4.2.1	Symmetrie von Oberflächen .....	293
4.2.2	Rekonstruktionen von Oberflächen .....	295
4.2.3	Notation von Einheitszellen und Überstrukturen .....	301
4.2.4	Vizinale Oberflächen und Defekte auf Oberflächen .....	303
4.2.5	Wichtige Methoden zur Untersuchung der Struktur von Oberflächen .....	304
4.3	Grenzflächen als Kontinuum .....	308
4.3.1	Die Thermodynamik von Grenzflächen .....	308
4.3.2	Kollektive Anregungen .....	318
4.3.3	Elastostatik von Oberflächen .....	321
4.4	Adsorption .....	327
4.4.1	Allgemeines zu Adsorbatstrukturen .....	328
4.4.2	Bindung von Adsorbaten .....	334
4.4.3	Adsorptionsgleichgewichte .....	343
4.4.4	Desorption und Desorptionsspektroskopie .....	347
4.5	Quantenzustände an Oberflächen .....	351
4.5.1	Vibronische Oberflächenzustände .....	351
4.5.2	Elektronenzustände an Oberflächen .....	360
4.6	Nichtperiodische Bewegungen von Atomen an Oberflächen – Diffusion und Fluktuationen .....	366
4.6.1	Stochastische Bewegung von Einzelatomen .....	366
4.6.2	Absolute Raten Theorie .....	367
4.6.3	Übergang zum Kontinuumsmodell .....	369
4.6.4	Ein Beispiel für ein Diffusionsproblem .....	371
4.6.5	Ostwald-Reifung .....	373
4.6.6	Brown'sche Bewegung von Inseln und Fluktuationen .....	378
4.7	Keimung und Wachstum .....	380
4.7.1	Keimbildung fern vom Gleichgewicht .....	381
4.7.2	Thermodynamisches Modell der Keimbildung .....	384
4.7.3	Wachstum nach der Keimung .....	385

4.7.4	Wachstum auf vizinalen Flächen .....	389
4.7.5	Mäander-Instabilitäten von Stufen .....	392
4.7.6	Wachstum verspannter Filme .....	395

## 5 Magnetismus

*Burkard Hillebrands, Stefan Blügel*

5.1	Grundlagen .....	401
5.1.1	Maßsysteme, Definitionen und Grundgleichungen .....	401
5.1.2	Das magnetische Moment .....	403
5.1.3	Die Spin-Bahn-Wechselwirkung .....	405
5.1.4	Hund'sche Regeln .....	405
5.1.5	Die Zeeman-Aufspaltung .....	406
5.2	Ensembles nicht-koppelnder magnetischer Momente .....	407
5.2.1	Paramagnetismus lokalisierter Momente – klassische Betrachtung .....	407
5.2.2	Paramagnetismus lokalisierter Momente – quantenmechanische Betrachtung .....	409
5.2.3	Paramagnetismus von Leitungselektronen .....	412
5.2.4	Diamagnetismus .....	414
5.2.5	Kristallfeld-Wechselwirkung .....	415
5.3	Gekoppelte magnetische Momente .....	416
5.3.1	Dipol-Dipol-Wechselwirkung .....	416
5.3.2	Direkte Austauschwechselwirkung .....	417
5.3.3	Ferromagnetismus lokaler Momente .....	422
5.3.4	Itineranter Ferromagnetismus .....	424
5.3.5	Weitere Austausch-Wechselwirkungsmechanismen .....	431
5.3.6	Antiferromagnetismus und Ferrimagnetismus .....	434
5.3.7	Selten-Erd-Metalle .....	438
5.4	Magnetische Anisotropie .....	439
5.4.1	Formanisotropie .....	440
5.4.2	Magnetokristalline Anisotropie .....	442
5.4.3	Magnetoelastische Anisotropie .....	444
5.5	Magnetooptische Effekte .....	445
5.6	Spindynamik .....	448
5.6.1	Präzession der Magnetisierung .....	448
5.6.2	Austauschdominierte Spinwellen .....	450
5.6.3	Dipolare Spinwellen .....	453
5.6.4	Messverfahren .....	454
5.6.5	Magnetismus auf der Femtosekunden-Zeitskala .....	455
5.7	Domänen und Domänenwände .....	458
5.7.1	Mikromagnetische Grundgleichungen .....	458
5.7.2	Block- und Néel-Wände .....	459
5.7.3	Domänenstrukturen .....	461
5.7.4	Ummagnetisierungseigenschaften und Koerzitivität .....	461
5.8	Oberflächenmagnetismus .....	464
5.8.1	Erhöhte magnetische Momente .....	465
5.8.2	Temperaturabhängigkeit .....	467

5.8.3	Grenzflächenanisotropie .....	468
5.8.4	Reorientierungsübergang .....	469
5.9	Zwischenschichtkopplung .....	470
5.9.1	Mikroskopische Modelle für die bilineare Kopplung .....	471
5.9.2	„Orange-Peel“-Kopplung .....	474
5.9.3	Exchange-Bias-Effekt .....	474
5.10	Spinabhängiger Transport .....	475
5.10.1	Anisotroper Magnetowiderstand .....	476
5.10.2	Riesenmagnetowiderstand .....	476
5.10.3	Tunnelmagnetowiderstand .....	478
5.10.4	Spin-Ströme .....	479
5.11	Einige Anwendungen .....	479
5.11.1	Spinventil-Strukturen .....	479
5.11.2	Positions- und Drehsensoren .....	480
5.11.3	Magnetische Festplatte .....	481
5.11.4	Magnetisches Random-Access-Memory .....	481
5.12	Ausblick .....	482

## 6 Supraleitung

*Hilbert v. Löhneysen*

6.1	Grundlegende Aspekte der Supraleitung .....	486
6.1.1	Verschwinden des elektrischen Widerstands .....	486
6.1.2	Meißner-Ochsenfeld-Effekt .....	487
6.1.3	Supraleiter 1. und 2. Art .....	488
6.1.4	Auftreten von Supraleitung .....	494
6.2	Phänomenologische Modelle .....	496
6.2.1	Die London-Gleichungen .....	496
6.2.2	Ginzburg-Landau-Theorie .....	499
6.3	Grundzüge der BCS-Theorie .....	504
6.3.1	Cooper-Paare .....	505
6.3.2	Beispiel für attraktive Wechselwirkung: Elektron-Phonon-Kopplung .....	507
6.3.3	BCS-Grundzustand .....	508
6.3.4	Endliche Temperaturen und äußere Felder .....	510
6.3.5	Quasiteilchenzustandsdichte und Quasiteilchentunneln .....	514
6.4	Josephson-Effekte .....	519
6.4.1	Phase der makroskopischen Wellenfunktion .....	519
6.4.2	Josephson-Gleichungen .....	520
6.4.3	Josephson-Kontakt im Magnetfeld .....	521
6.4.4	SQUIDS .....	523
6.5	Spezielle supraleitende Materialien .....	524
6.5.1	Supraleiter aus Übergangsmetallen .....	524
6.5.2	Supraleiter mit magnetischen Atomen .....	526
6.5.3	Supraleitende Kuprate .....	531

## 7 Halbleiter

*Rainer Kassing*

7.1	Einführung .....	543
7.2	Warum Halbleiter? Definition der Halbleiter .....	545
7.3	Übersicht über die Halbleiter .....	546
7.4	Energiebändermodell und elektronische Halbleitung .....	548
7.4.1	Bändermodell bekannter Halbleiter .....	549
7.4.2	Die effektive Masse .....	550
7.4.3	Eigenleitung .....	550
7.4.4	Störstellenleitung .....	552
7.4.5	Übersicht über die Methoden der Halbleiterdotierung .....	555
7.5	Das Fermi-Niveau und die Dichten freier Ladungsträger .....	557
7.5.1	Bedeutung des Eigenleitungs-Fermi-Niveaus .....	557
7.5.2	Berechnung des Fermi-Niveaus bei Störstellenleitung .....	561
7.5.3	Temperaturabhängigkeit der Ladungsträgerkonzentration .....	563
7.6	Transporterscheinungen .....	565
7.6.1	Driftprozesse .....	565
7.6.2	Diffusionsprozesse .....	569
7.7	Generations- und Rekombinationsprozesse .....	570
7.7.1	Generations- und Rekombinationsraten .....	570
7.7.2	Lebensdauer der Ladungsträger im Eigenhalbleiter .....	571
7.7.3	Lebensdauer der Ladungsträger im Störstellenhalbleiter .....	573
7.7.4	Abschätzung der Zeitkonstanten .....	576
7.7.5	Energetische tief liegende Niveaus .....	577
7.7.6	Messung der Zeitkonstanten, raumladungsbegrenzte Ströme .....	579
7.7.7	Diffusionslänge .....	584
7.7.8	Der Dember-Effekt .....	584
7.8	Die Halbleiteroberfläche .....	586
7.8.1	Phasengrenze Halbleiter-Gasphase .....	587
7.9	Halbleiterbauelemente .....	590
7.9.1	Der Metall-Isolator-Halbleiter – (MIS-)Kondensator .....	590
7.9.2	Bänderschema des MOS-Kondensators .....	595
7.9.3	Berechnung der Kapazität des MOS-Kondensators .....	598
7.9.4	Einfluss von Oxid-Ladungen, tiefen Niveaus und Grenzflächenzuständen ..	602
7.10	Technologie des Silizium-MOS-Kondensators .....	607
7.11	Raumladungsschichten an Kontaktübergängen .....	608
7.11.1	Kontakt zwischen Metall und Halbleiter .....	608
7.11.2	Quantenmechanische Einflüsse .....	614
7.11.3	Analyse tiefer Störstellen (DLTS-Verfahren) .....	616
7.12	Der Halbleiter-Halbleiter-Kontakt, die Bipolar-Diode .....	620
7.12.1	Die $I$ -, $U$ -Kennlinie der pn-Diode .....	620
7.12.2	Die Solarzelle .....	629
7.12.3	Die Photodiode .....	638
7.12.4	Die Tunneldiode .....	640
7.12.5	Halbleiter-Heteroübergänge .....	643

7.13	Bauelemente mit mehrfachen Raumladungsschichten .....	646
7.13.1	Der Bipolar-Transistor .....	647
7.13.2	Grundsaltungen des Bipolar-Transistors .....	651
7.13.3	Der MOS-Feldeffekt-Transistor (MOS-FET) .....	653
7.13.4	Der Thyristor .....	668
7.13.5	Der IGBT (Insulated Gate Bipolar-Transistor) .....	673
7.14	Einige grundlegende Experimente der Halbleiterphysik .....	674
7.14.1	Messung der Leitfähigkeit .....	674
7.14.2	Der Gunn-Effekt .....	675
7.14.3	Der Hall-Effekt .....	679
7.14.4	Der Quanten-Hall-Effekt .....	682
7.15	Eigenschaften des nichtkristallinen Halbleiters .....	686
7.15.1	Eigenschaften des hochdotierten Halbleiters .....	687
7.15.2	Eigenschaften polykristalliner Halbleiter .....	688
7.15.3	Eigenschaften amorpher Halbleiter .....	691
7.16	Ausblick .....	695
7.16.1	Fragen an die zukünftige Halbleitertechnik .....	695
7.16.2	Entwicklungstendenzen von Bauelementen .....	695
7.16.3	Sensoren und Aktuatoren, Mikro-, Nano-Systeme .....	700

## 8 Materialien der Optoelektronik – Grundlagen und Anwendungen

*Hartmut Hillmer, Josef Salbeck*

8.1	Einleitung .....	707
8.1.1	Lumineszenz .....	708
8.2	Grundlagen optischer Eigenschaften der Festkörper .....	714
8.2.1	Lumineszenzmodelle/Elektronische Energieschemata .....	715
8.2.2	Dielektrische Materialeigenschaften .....	731
8.2.3	Nichtlineare Optik .....	732
8.3	Dielektrische Materialien .....	734
8.3.1	Anorganische Gläser .....	734
8.3.2	Amorphe dielektrische Materialien für Dünnschicht- und Wellenleiterstrukturen .....	746
8.3.3	Amorphe organische dielektrische Materialien für Fasernanwendungen .....	747
8.3.4	Kristalline anorganische dielektrische Materialien .....	748
8.3.5	Keramische Werkstoffe .....	752
8.4	(Anorganische) Halbleiter .....	753
8.4.1	Grundlagen .....	753
8.4.2	Quanteneffekte und verspannte Halbleiter-Heterostrukturen .....	757
8.4.3	Epitaktische Herstellung von Halbleiter-Heterostrukturen .....	768
8.4.4	Optische Eigenschaften von III/V-Halbleitern .....	775
8.4.5	Effiziente Emission auf der Basis von Si .....	780
8.4.6	LEDs auf der Basis anorganischer Halbleiter .....	781
8.4.7	Klassifikation von Halbleiterlasern .....	786
8.4.8	Kantenemittierende Laser mit horizontalem Resonator .....	788
8.4.9	Oberflächenemittierende Laser mit vertikalem Resonator .....	797
8.4.10	Kantenemitter und VCSEL's mit niederdimensionaler aktiver Zone .....	800

8.4.11	Mikromechanisch abstimmbare Filter und VCSELs .....	801
8.4.12	Laser mit externem Resonator .....	804
8.5	Organische Festkörper .....	805
8.5.1	Ladungstransport in organischen Festkörpern .....	806
8.5.2	Injektion von Ladungsträgern .....	807
8.5.3	Organische Leuchtdioden .....	809

9 Werkstoffe

*Ludwig K. Thomas*

9.1	Vorbemerkung zum Begriff Werkstoffe .....	821
9.2	Strukturen von Werkstoffen .....	822
9.2.1	Mikrostruktur .....	822
9.2.2	Makrostruktur .....	823
9.2.3	Oberflächen .....	824
9.3	Herstellung und Verarbeitung .....	825
9.3.1	Verwendung natürlicher Rohstoffe .....	826
9.3.2	Verwendung synthetischer Rohstoffe .....	828
9.3.3	Verarbeitung .....	829
9.4	Zustandsdiagramme .....	836
9.4.1	Thermodynamische Grundlagen .....	836
9.4.2	Beispiele von Zustandsdiagrammen realer Systeme .....	842
9.4.3	Ungleichgewichtszustände .....	846
9.4.4	Umwandlungen von Werkstoffen .....	851
9.4.5	Wärmebehandlung von Werkstoffen .....	858
9.4.6	Erholung und Rekristallisation .....	859
9.5	Werkstoffprüfung .....	860
9.5.1	Grundlagen .....	861
9.5.2	Mechanische Prüfverfahren .....	861
9.5.3	Zerstörungsfreie Prüfung .....	866
9.5.4	Thermische Analyse .....	870
9.6	Mechanische Eigenschaften .....	870
9.6.1	Abgrenzung und Überblick .....	870
9.6.2	Elastische Eigenschaften .....	871
9.6.3	Plastische Eigenschaften .....	875
9.6.4	Zeitabhängigkeit der Verformung .....	884
9.6.5	Temperaturabhängigkeit der Verformung .....	889
9.6.6	Bruch .....	891
9.6.7	Mechanische Modelle .....	897
9.6.8	Pseudoelastizität (Gedächtnis-Effekt) .....	898
9.6.9	Festigkeitssteigerung .....	900
9.6.10	Gewichtsverminderung .....	904
9.6.11	Tribologie .....	904
9.7	Physikalische Eigenschaften .....	906
9.7.1	Vorbemerkung .....	906
9.7.2	Elektrische Leitfähigkeit .....	907
9.7.3	Dielektrische Eigenschaften .....	914

9.7.4	Optische Eigenschaften .....	916
9.7.5	Thermische Eigenschaften .....	920
9.7.6	Wechselwirkung zwischen Strahlung und Werkstoff .....	925
9.8	Chemische Eigenschaften .....	926
9.8.1	Chemische Reaktionen im Innern .....	927
9.8.2	Chemische Reaktionen an Oberflächen .....	928
9.8.3	Schädigung bei hohen Temperaturen .....	936
9.8.4	Biologische Verträglichkeit .....	941
9.8.5	Wasserstoffspeicherung in Metallhydriden .....	942
9.8.6	Recycling, Entsorgung, Verwertung von Werkstoffen .....	943
9.9	Zukünftige Entwicklungen .....	944
Register	.....	951