

Vorlesungsskript

**Physik IV**

**Statistik**

**Festkörperphysik**

**Kern- und Teilchenphysik**

Sommersemester 2005, 2009, 2012, 2013, 2018, 2020

Ruhr-Universität Bochum

**Prof. A. von Keudell**

15. Juli 2020

---

## Vorwort

Diese Notizen sind aus der Vorlesung "Physik IV, Festkörperphysik, Kern- und Teilchenphysik" entstanden. Als wesentliche Quellen wurden die Bücher von Reif (*Statistische Physik und Theorie der Wärme*), Alonso Finn (*Quantenphysik und statistische Physik*), Kittel (*Festkörperphysik*), Ashcroft Mermin (*Solid State Physics*), Musiol (*Kern- und Teilchenphysik*), Simonyi (*Kulturgeschichte der Physik*) verwendet. Diese Notizen sollen und können natürlich diese Bücher nicht ersetzen und verstehen sich als Ergänzung.

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Statistik</b>	<b>6</b>
1.1	klassische Statistik:	
	Maxwell-Boltzmann-Verteilung . . . . .	6
1.1.1	Verteilung . . . . .	6
1.1.2	Das ideale Gas . . . . .	11
1.1.3	Entropie (Vertiefung) . . . . .	13
1.2	Quantenstatistik:	
	Fermi-Dirac-Verteilung . . . . .	15
1.2.1	Verteilung . . . . .	15
1.2.2	Das freie Elektronengas . . . . .	17
1.3	Quantenstatistik:	
	Bose-Einstein-Verteilung . . . . .	19
1.3.1	Verteilung . . . . .	19
1.3.2	Das Photonengas (Vertiefung) . . . . .	20
1.3.3	Das ideale Gas in der Quantenstatistik . . . . .	21
<b>2</b>	<b>Festkörperphysik</b>	<b>23</b>
2.1	Kristallgitter . . . . .	23
2.1.1	Der reale Raum . . . . .	23
2.1.2	Der reziproke Raum . . . . .	26
2.1.3	Experimentelle Beugungsmethoden . . . . .	34
2.2	Bindungstypen von Kristallen . . . . .	36
2.3	Gitterschwingungen . . . . .	38
2.3.1	Lineare Kette mit 1 Atom pro Einheitszelle . . . . .	38
2.3.2	Kette mit 2 Atomen pro Einheitszelle . . . . .	41
2.3.3	Quantisierung der Gitterschwingungen, Phononen . . . . .	43
2.3.4	Wärmekapazität von Festkörpern . . . . .	45
2.3.5	Mößbauer-Spektroskopie . . . . .	49
2.4	Das freie Elektronengas . . . . .	52
2.4.1	Zustandsdichte, Fermienergie . . . . .	52

2.4.2	Spezifische Wärme der Elektronen . . . . .	53
2.4.3	Transport von Strom und Wärme . . . . .	55
2.5	Elektronen in periodischen Potentialen . . . . .	60
2.5.1	Ursprung der Bandlücke . . . . .	60
2.5.2	Bandstruktur-Rechnungen . . . . .	63
2.5.3	Konzept der effektiven Masse . . . . .	68
2.5.4	Metalle, Isolatoren . . . . .	69
2.6	Halbleiter . . . . .	71
2.6.1	Allgemeines . . . . .	71
2.6.2	Eigenleitung . . . . .	73
2.6.3	Dotierte Halbleiter . . . . .	76
2.6.4	pn Übergang . . . . .	80
2.7	Supraleitung (Vertiefung) . . . . .	83
2.7.1	Phänomenologie . . . . .	84
2.7.2	Energielücke . . . . .	87
2.7.3	Supraleiter im Magnetfeld . . . . .	87
2.7.4	Supraleiter 1. / 2. Art . . . . .	91
2.7.5	Josephson-Effekte . . . . .	94
2.8	Magnetismus (Vertiefung) . . . . .	100
2.8.1	Diamagnetismus . . . . .	100
2.8.2	Paramagnetismus . . . . .	111
2.8.3	Ferromagnetismus . . . . .	117
<b>3</b>	<b>Kernphysik</b> . . . . .	<b>119</b>
3.1	Aufbau Atomkerne . . . . .	119
3.1.1	Größe Atomkern . . . . .	119
3.1.2	Innere Struktur . . . . .	123
3.1.3	Magnetische Kern-Momente . . . . .	125
3.1.4	Elektrische Kern-Momente . . . . .	132
3.2	Bindungsenergie - Atomkerne . . . . .	133
3.2.1	Tröpfchenmodell . . . . .	134
3.2.2	Schalenmodell (Vertiefung) . . . . .	139
3.2.3	Deformierte Kerne (Vertiefung) . . . . .	143
3.2.4	Eigenschaft der Kernkraft . . . . .	144
3.3	Radioaktivität . . . . .	145
3.3.1	Allgemeines . . . . .	145
3.3.2	$\alpha$ -Zerfall . . . . .	150
3.3.3	$\beta$ -Zerfall . . . . .	152
3.3.4	$\gamma$ -Zerfall . . . . .	160
3.4	Experimentelle Methoden der Kernphysik . . . . .	164

---

3.4.1	Allgemeines . . . . .	164
3.4.2	Potential-Beschleuniger . . . . .	164
3.4.3	Linear-Beschleuniger . . . . .	167
3.4.4	Kreis-Beschleuniger . . . . .	167
3.4.5	Wechselwirkung Strahlung / Materie . . . . .	171
3.4.6	Detektoren . . . . .	178
3.5	Kernreaktionen . . . . .	182
3.5.1	Allgemeines . . . . .	182
3.5.2	Kernspaltung . . . . .	185
3.5.3	Kernfusion . . . . .	190
<b>4</b>	<b>Teilchenphysik</b>	<b>194</b>
4.1	Mesonen . . . . .	195
4.1.1	$\pi$ -Mesonen, Pionen . . . . .	195
4.1.2	K-Mesonen, Kaonen . . . . .	198
4.2	Baryonen . . . . .	199
4.3	Leptonen . . . . .	199
4.4	Standard-Modell . . . . .	201
4.4.1	Quarks . . . . .	202
4.4.2	Gluonen . . . . .	205
<b>5</b>	<b>Fragenkatalog</b>	<b>209</b>
5.1	Kapitel 1: Statistik . . . . .	209
5.2	Kapitel 2: Festkörper . . . . .	209
5.3	Kapitel 3: Kernphysik . . . . .	211
5.4	Kapitel 4: Teilchenphysik . . . . .	212
<b>A</b>	<b>Formelsammlung</b>	<b>213</b>

# Kapitel 1

## Statistik

Für die Beschreibung von Vielteilchensystemen können unterschiedliche Formen der Statistik verwendet werden, die beschreibt wie sich die Teilchen eines Ensembles auf die möglichen Zustände eines Systems verteilen. Im folgenden werden diese Verteilungen abgeleitet.

### 1.1 klassische Statistik: Maxwell-Boltzmann-Verteilung

#### 1.1.1 Verteilung

Betrachten wir zunächst ein Ensemble aus  $N$  Teilchen, das sich auf  $i$  Zustände verteilen kann mit entsprechenden Energieeigenwerten  $E_i$ . Die Gesamtzahl der Teilchen ist:

$$N = n_1 + n_2 + \dots = \sum_i n_i \quad (1.1)$$

und die Gesamtenergie  $U$  des Ensembles ist

$$U = n_1 E_1 + n_2 E_2 + \dots = \sum_i n_i E_i \quad (1.2)$$

Wie verteilen sich jetzt die Anzahlen an Teilchen  $n_i$  auf die einzelnen Zustände  $i$ ? Zunächst sind alle Möglichkeiten gleichberechtigt, wie z.B. alle  $N$  Teilchen in den Zustand  $i = 1$  zu setzen. Allerdings ist diese Möglichkeit sehr unwahrscheinlich, da sich in der Natur durch irreversible Prozesse ein **thermisches Gleichgewicht** einstellt, das gleichzeitig der wahrscheinlichsten Verteilung bzw. der Verteilung mit der größten Anzahl an Realisierungsmöglichkeiten entspricht.

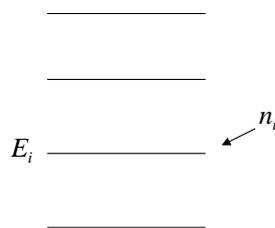
Betrachten wir dazu ein einfaches Beispiel bei der ein Ensemble von 10 Teilchen, die Zustände mit 11 Energieeigenwerten  $E_1 = 0eV$ ,  $E_2 = 1eV$  bis  $E_{11} = 10eV$  besetzen kann. Die Gesamtenergie sei als  $U = 10eV$  vorgegeben. Eine Möglichkeit einer Verteilung wäre es, einem Teilchen dem Zustand  $E_{11} = 10eV$  zuzuweisen und allen anderen 9 Teilchen den Zustand  $E_1 = 0eV$ . Dies wäre die einzige Realisierungsmöglichkeit für diese Verteilung. Verteilt man allerdings die Energie auf mehrere Teilchen da man Zustände zu  $E_1 = 0eV$ ,  $E_2 = 1eV$ ,  $E_3 = 2eV$  benutzt, erkennt man dass es ein große Zahl an Kombinationsmöglichkeiten gibt, die alle zu der Gesamtenergie  $U = 10eV$  führen. D.h. die letztere Verteilung besitzt mehr Realisierungsmöglichkeiten und damit eine größere Wahrscheinlichkeit.

Die Entropie einer Verteilung läßt sich per Definition aus den Realisierungsmöglichkeiten  $\Omega$  ableiten.

$$S = k_B \ln \Omega \quad (1.3)$$

D.h. eine Verteilung mit nur einer Realisierungsmöglichkeit besitzt die Entropie  $S = 0$ . Diese Entropie steigt mit der Zahl an Realisierungsmöglichkeiten. Nach dem zweiten Hauptsatz der Thermodynamik durchläuft ein System irreversible Prozesse mit  $dS > 0$  bis es das thermische Gleichgewicht bzw. **maximale Entropie** gefunden hat. D.h. die eingangs gesuchte Verteilung  $n_i$  auf die Zustände  $i$  entspricht einer Verteilung mit maximaler Entropie bzw. der größten Wahrscheinlichkeit bzw. der größten Anzahl an Realisierungsmöglichkeiten.

Jetzt gilt es die Zahl der Möglichkeiten zu bestimmen, in der wir die  $N$  Teilchen auf  $i$  Zustände verteilen können. Nehmen wir an, daß wir Zustand 1 mit  $n_1$  Teilchen besetzen, so haben wir ( $n_1$  aus  $N$ ) Möglichkeiten dies bei identischen Teilchen zu tun:



**Abbildung 1.1:** Besetzung der Zustände gemäß Maxwell-Boltzmann-Statistik.  $n_i$  Teilchen werden in den Zustand  $i$  mit dem Energieeigenwert  $E_i$  eingefüllt. Dieser Zustand liegt mit der Wahrscheinlichkeit  $g_i$  (bzw. Entartung) in dem System vor.

$$\frac{N!}{n_1!(N - n_1)!} \quad (1.4)$$

Die Faktoren  $n_1!$  und  $(N - n_1)!$  berücksichtigen, daß die Reihenfolge der identischen Teilchen im Zustand 1 beliebig sein darf. Für die Besetzung des zweiten Zustandes verbleiben jetzt nur noch  $N - n_1$  Teilchen und man erhält als Zahl der Möglichkeiten für die Besetzung von Zustand 2 mit  $n_2$  Teilchen:

$$\frac{(N - n_1)!}{n_2!(N - n_1 - n_2)!} \quad (1.5)$$

Die Gesamtzahl der Möglichkeiten für eine gegebene Verteilung (=  $n_1$  Teilchen in Zustand 1,  $n_2$  Teilchen in Zustand 2 usw.) ergibt folgenden Ausdruck:

$$\frac{N!}{n_1!(N - n_1)!} \frac{(N - n_1)!}{n_2!(N - n_1 - n_2)!} \cdots = \frac{N!}{n_1!n_2!\dots n_i!} \quad (1.6)$$

Daraus erhält man eine *Wahrscheinlichkeit* für eine bestimmte Verteilung, indem man durch die Gesamtzahl der Permutationen  $N!$  teilt:

$$p = \frac{1}{n_1!n_2!\dots n_i!} \quad (1.7)$$

Zusätzlich läßt sich noch berücksichtigen, daß die einzelnen Zustände mit unterschiedlicher Wahrscheinlichkeit  $g_i$  besetzt werden. Entsprechend ist die Wahrscheinlichkeit  $n_i$  Teilchen im Zustand  $i$  zu finden<sup>1</sup>  $g_i^{n_i}$ . Unter Berücksichtigung dieser unterschiedlichen Gewichte ergibt sich für die Wahrscheinlichkeit einer Verteilung:

$$p = \prod_i \frac{g_i^{n_i}}{n_i!} \quad (1.8)$$

Im folgenden ist es zweckmäßig nicht die Wahrscheinlichkeit direkt, sondern deren Logarithmus zu betrachten<sup>2</sup>.

$$\ln p = n_1 \ln g_1 + n_2 \ln g_2 + \dots - \ln n_1! - \ln n_2! - \dots \quad (1.9)$$

Unter der Annahme, daß die Zahl der Teilchen groß ist, können wir den Ausdruck mit der Stirlingformel  $\ln x! = x \ln x - x$  erweitern und erhalten:

<sup>1</sup>Dies ist nur die Wahrscheinlichkeit für  $n_i$  Teilchen im Zustand  $i$  und darf nicht verwechselt werden mit der Gesamt-Wahrscheinlichkeit für eine bestimmte Verteilung (gegeben als  $n_1, n_2, n_3 \dots n_i$ ).

<sup>2</sup>Die Lage des Maximums von  $p$  und von  $\ln p$  ist identisch.

$$\begin{aligned}\ln p &= n_1 \ln g_1 + n_2 \ln g_2 + \dots - n_1 \ln n_1 + n_1 - n_2 \ln n_2 + n_2 - \dots \\ &= N - \sum_i n_i \ln \frac{n_i}{g_i}\end{aligned}\quad (1.10)$$

Die Verteilung  $n_i$  wird nun durch das Maximum dieser Wahrscheinlichkeit unter Berücksichtigung der Nebenbedingungen ermittelt. Nebenbedingungen sind die konstante Gesamtzahl der Teilchen (Teilchenerhaltung) und die Gesamtenergie des Ensembles (Energieerhaltung):

$$\sum_i n_i = N \quad (1.11)$$

$$\sum_i n_i E_i = U \quad (1.12)$$

Diese Nebenbedingungen werden mit Lagrange-Parametern  $\alpha'$  und  $\beta'$  berücksichtigt. Man bildet dazu das Funktional:

$$\mathcal{L} = \ln p + \alpha' \left( \sum_i n_i - N \right) + \beta' \left( \sum_i n_i E_i - U \right) \quad (1.13)$$

bzw.

$$\mathcal{L} = N - \sum_i n_i \ln \frac{n_i}{g_i} + \alpha' \left( \sum_i n_i - N \right) + \beta' \left( \sum_i n_i E_i - U \right) \quad (1.14)$$

Die Ableitung dieses Funktionals nach  $n_i$  ergibt:

$$\sum_i \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial n_i} = - \sum_i \ln \frac{n_i}{g_i} - \sum_i 1 + \alpha' \sum_i 1 + \beta' \sum_i E_i \quad (1.15)$$

Die Terme  $\sum_i$  ergeben die Gesamtzahl an Teilchen  $N$ . Damit läßt sich der Term  $-\sum_i 1 + \alpha' \sum_i$  als neuer Parameter  $-\alpha \sum_i$  abkürzen bzw.  $\beta = -\beta'$ . In dieser Notation erhält man als kompaktes Ergebnis:

$$\sum_i \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial n_i} = - \sum_i \left( \ln \frac{n_i}{g_i} + \alpha + \beta E_i \right) \quad (1.16)$$

Das Maximum ergibt sich aus der Forderung  $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial n_i} = 0$ . Nachdem  $g_i$  und  $E_i$  frei wählbar sein sollen, muß nicht nur die Summe, sondern jeder Summand

für sich jeweils Null ergeben. D.h. man fordert für jede gesuchte Besetzungszahl  $n_i$ :

$$\ln \frac{n_i}{g_i} + \alpha + \beta E_i = 0 \quad (1.17)$$

Dies läßt sich umstellen zu:

$$n_i = g_i e^{-\alpha - \beta E_i} \quad (1.18)$$

Der Lagrange-Multiplikator  $\alpha$  bestimmt sich aus der Normierung zu:

$$N = \sum_i n_i = \sum_i g_i e^{-\alpha - \beta E_i} = e^{-\alpha} \underbrace{\sum_i g_i e^{-\beta E_i}}_Z \quad (1.19)$$

Die Größe  $Z$  bezeichnet man als **Zustandssumme**:

$$\boxed{Z = \sum_i g_i e^{-\beta E_i}} \quad (1.20)$$

Die Zustandssumme spielt eine zentrale Rolle, da aus ihr alle Größen der Thermodynamik abgeleitet werden. Schwierigkeit bei der Berechnung der Zustandssumme für ein gegebenes System besteht in der Bestimmung der Wahrscheinlichkeiten (bzw. Entartung, siehe unten)  $g_i$ . Unter Verwendung dieser Zustandssumme  $Z$  läßt sich die Verteilung schreiben als:

$$n_i = \frac{N}{Z} g_i e^{-\beta E_i} \quad (1.21)$$

Der zweite Lagrange-Multiplikator  $\beta$  errechnet sich aus der Bedingung der Gesamtenergie  $U = n_1 E_1 + n_2 E_2 + \dots$  zu:

$$U = \frac{N}{Z} (g_1 E_1 e^{-\beta E_1} + \dots) = \frac{N}{Z} \sum_i g_i E_i e^{-\beta E_i} \quad (1.22)$$

bzw.

$$U = -\frac{N}{Z} \frac{\partial}{\partial \beta} Z = -N \frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z \quad (1.23)$$

Per Definition wird der Koeffizient  $\beta$  gleich gesetzt mit dem Kehrwert des Produkts aus Boltzmann-Konstante  $k_B$  und Temperatur  $T$ .

$$\boxed{k_B T = \frac{1}{\beta}} \quad (1.24)$$

Damit bekommt man schließlich die **Maxwell-Boltzmann-Statistik** zu:

$$n_i = \frac{N}{Z} g_i e^{-\frac{E_i}{k_B T}} \quad (1.25)$$

### 1.1.2 Das ideale Gas

Für das ideale Gas lassen sich jetzt mehrere Größen ableiten. Betrachten wir zunächst freie Teilchen gemäß der Energie-Impuls-Beziehung:

$$E_i = \frac{p_i^2}{2m} \quad (1.26)$$

Die Zustandssumme ist:

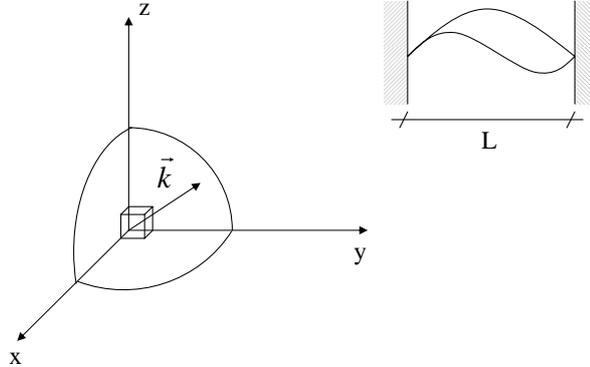
$$Z = \sum_i e^{-\frac{E_i}{k_B T}} g(E_i) = \int_0^\infty e^{-\frac{E}{k_B T}} g(E) dE \quad (1.27)$$

Wie muß jetzt  $g(E)$  berechnet werden? Hierfür gibt es zwei Ansätze. Zum einen kann man jedem Teilchen einen Impuls zuschreiben entsprechend seiner kinetischen Energie. In einem begrenzten Volumen des Phasenraums ( $d\vec{p}d\vec{x}$ ) gibt es allerdings nicht unendliche viele Möglichkeiten für  $\vec{p}$ , da nach der Heisenberg'schen Unschärferelation ( $\Delta x \Delta p \geq h$  in einer Dimension) das minimale Volumen  $h^3$  ist. Alternativ dazu kann man  $g(E)$  auch aus dem Wellenbild ableiten: die Teilchen eines idealen Gases in einem Volumen  $V$  (z.B. Würfel mit Kantenlänge  $L$ ) beschreiben wir nach den Regeln der Quantenmechanik als ebene Wellen mit Wellenvektor  $\vec{k}$ , der den periodischen Randbedingungen dieses Volumen genügen muss:

$$\vec{k} = n_x \frac{\pi}{L} \vec{e}_x + n_y \frac{\pi}{L} \vec{e}_y + n_z \frac{\pi}{L} \vec{e}_z \quad n_x, n_y, n_z = 1, 2, \dots \quad (1.28)$$

Die Zahl  $\tilde{N}$  der möglichen Wellen mit einem Wellenvektor bis zu einem maximalen Betrag von  $|\vec{k}_{max}|$  ergibt sich aus einer Abzählung im Phasenraum. Da jeder Zustand durch diskrete Werte für  $k$  (wegen  $n_x, n_y, n_z$  als ganze Zahlen) gekennzeichnet ist, ist das kleinste mögliche Volumen im Phasenraum  $(\frac{\pi}{L})^3$ . D.h. die Anzahl  $\tilde{N}$  erhält man wenn man das Volumen der Kugel mit Radius  $k_{max}$  im Phasenraum durch das kleinste mögliche Volumen teilt (siehe Abb. 1.2). Dies ergibt:

$$\tilde{N} = \frac{1}{8} \frac{4\pi}{3} k_{max}^3 \frac{1}{(\frac{\pi}{L})^3} \quad (1.29)$$



**Abbildung 1.2:** Abzählen der möglichen Zustände im Phasenraum bis zu einem maximalen Wellenvektor  $\vec{k}$

Der zusätzliche Faktor  $1/8$  berücksichtigt den Umstand, daß wir nur positive Werte von  $n_x, n_y, n_z$  zählen wollen. D.h. nur ein Oktant der Kugel im Phasenraum darf verwendet werden.

Nach deBroglie entspricht die Energie-Impuls-Beziehung der ebenen Wellen mit  $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ :

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (1.30)$$

mit dem Volumen  $V = L^3$  ergibt sich:

$$\tilde{N} = V \frac{1}{8} \frac{4\pi}{3} \frac{1}{\pi^3} \left( \frac{E2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \quad (1.31)$$

$g(E)$  läßt sich durch Differenzieren bestimmen gemäß:

$$g(E) = \frac{d\tilde{N}}{dE} = V \frac{4\pi}{h^3} (2m^3)^{1/2} E^{1/2} \quad (1.32)$$

Schließlich ergibt sich für die Zustandssumme eines idealen Gases:

$$Z = V \frac{4\pi (2m^3)^{1/2}}{h^3} \int_0^\infty E^{1/2} e^{-\frac{E}{k_B T}} dE \quad (1.33)$$

Das Integral aufgelöst liefert:

$$Z = V \frac{(2\pi m k_B T)^{3/2}}{h^3} \quad (1.34)$$

Die Zustandssumme ist eine wichtige Größe, da sich aus ihr alle Größen der Thermodynamik ableiten lassen. Dies sei am Beispiel der inneren Energie  $U$  illustriert. Dazu betrachten wir zunächst den Logarithmus der Zustandssumme:

$$\ln Z = C + \frac{3}{2} \ln k_B T \quad (1.35)$$

mit  $C$  einer Konstanten, die die verbleibenden Konstanten ( $V \frac{(2\pi m)^{3/2}}{h^3}$ ) enthält. Aus der Beziehung 1.23 für die Gesamtenergie  $U$  bekommt man den Ausdruck, wenn man für  $\ln Z$  gemäß

$$U = -N \frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z = \frac{3}{2} N k_B T \quad (1.36)$$

einsetzt. Die mittlere Energie eines Teilchens ergibt sich zu:

$$\langle E \rangle = \frac{U}{N} = \frac{3}{2} k_B T \quad (1.37)$$

Man erkennt, daß sich das klassische Ergebnis der Thermodynamik aus der statistischen Formulierung der Besetzung der Zustände nach Maxwell-Boltzmann-Statistik ableiten läßt.

### 1.1.3 Entropie (Vertiefung)

Die Ableitung der Verteilungsfunktion erfolgte durch ein Maximieren der Realisierungsmöglichkeiten. D.h. in einem abgeschlossenen System stellt sich diejenige Verteilung ein, die die meisten Realisierungsmöglichkeiten besitzt. Als Wahrscheinlichkeit dieser Verteilung hatten wir:

$$p = \prod_i \frac{g_i^{n_i}}{n_i!} \quad (1.38)$$

bzw. als Logarithmus

$$\ln p = N - \sum_i n_i \ln \frac{n_i}{g_i} \quad (1.39)$$

das Produkt aus dem Logarithmus dieser Wahrscheinlichkeit und der Boltzmann-Konstante ist als **Entropie** definiert<sup>3</sup>:

<sup>3</sup>Für die Entropie existieren zwei Definitionen. Zum einen  $S = k_B \ln \Omega$  aus der Zahl  $\Omega$  der Realisierungsmöglichkeiten einer Verteilung oder  $S = k_B \ln p$  mit  $p$  der Wahrscheinlichkeit für die Verteilung. Beide Versionen sind äquivalent, da im Gleichgewicht sowohl  $\Omega$  als auch  $p$  extremal werden.

$$\boxed{S = k_B \ln p} \quad (1.40)$$

D.h. in einem abgeschlossenen System stellt diejenige Verteilung ein, die eine maximale Entropie besitzt. Bei einem abgeschlossenen System fernab vom Gleichgewicht führen irreversible Prozesse immer zu einer Erhöhung der Entropie, solange bis das Gleichgewicht erreicht ist.

$$\boxed{dS \geq 0} \quad (1.41)$$

Dies bezeichnet man als **zweiten Hauptsatz der Thermodynamik**. Wie ist jetzt die Entropie mit der Zustandssumme verknüpft? Gehen wir zunächst von der Maxwell-Boltzmann-Statistik aus und erhalten für die Entropie:

$$S = k_B N - k_B \sum_i n_i \ln \frac{n_i}{g_i} \quad (1.42)$$

mit Gl. 1.25 in der Form

$$\ln \frac{n_i}{g_i} = \ln \frac{N}{Z} - \frac{E_i}{k_B T} \quad (1.43)$$

ergibt sich

$$S = k_B N - k_B \underbrace{\sum_i n_i \ln N}_{=N} + k_B \underbrace{\sum_i n_i \ln Z}_{=N} + k_B \underbrace{\sum_i n_i E_i}_{=U} \frac{1}{k_B T} \quad (1.44)$$

bzw.

$$S = \underbrace{k_B N - k_B N \ln N}_{=-k_B \ln N!} + \underbrace{k_B N \ln Z}_{k_B \ln Z^N} + \frac{U}{T} \quad (1.45)$$

Als Endergebnis erhält man:

$$S = k_B \ln \frac{Z^N}{N!} + \frac{U}{T} \quad (1.46)$$

Der Ausdruck  $\frac{Z^N}{N!}$  entspricht der Zustandssumme für  $N$  Teilchen, während  $Z$  nur die über die Zustände  $i$  aufsummiert, die ein Teilchen besetzen kann. Berechnet man die Zustandssumme für die Besetzung von  $i$  Zuständen durch  $N$  Teilchen, so ergibt sich  $Z^N$ . Da die Teilchen un-unterscheidbar sind, muß noch durch  $N!$  geteilt werden, d.h. es gilt:

$$Z(N - \text{Teilchen}) = \frac{Z(1 - \text{Teilchen})^N}{N!} \quad (1.47)$$

Nachdem die Zustandssumme  $Z$  eines idealen Gases mit  $T^{3/2}$  skaliert, ist die Temperatur auch ein Maß für die Entropie in einem System: Bei hoher Temperatur existieren viele Realisierungsmöglichkeiten, die mit einer Gesamtenergie  $U$  verträglich sind, während bei kleiner Temperatur nur wenige Realisierungsmöglichkeiten bestehen. Die Entropie ist demnach Maß für die **Unordnung** in einem System. Dies sei am Beispiel eines Paketes von beschleunigten Ionen illustriert. Betrachtet man zum Beispiel  $N$  Teilchen, die auf 1 MeV pro Teilchen beschleunigt wurden. Falls die Energie und der Ort sehr scharf definiert sind, gibt es nur wenige Permutationen, die mit der Gesamtenergie  $U = 1 \text{ MeV} \cdot N$  verträglich sind. Die Zustandssumme wird sehr klein und das Teilchenpaket ist sehr kalt.

Ist hingegen nur die Temperatur vorgegeben, kann die Energie  $U$  in dem System nur durch die Vorgabe einer zu geltenden Statistik abgeleitet werden.

## 1.2 Quantenstatistik: Fermi-Dirac-Verteilung

Bei der klassischen Statistik hatten wir uns nur die Frage gestellt, wie viele Möglichkeiten es gibt, eine bestimmte Verteilung  $(n_1, n_2, \dots)$  zu realisieren. Bei der Quantenstatistik wollen wir *zusätzlich* berücksichtigen, daß es für das Auffüllen eines Zustandes der Energie  $E_i$  mit  $n_i$  Teilchen mehrere Realisierungsmöglichkeiten gibt, falls der Zustand  $g_i$ -fach *entartet* ist<sup>4</sup>.

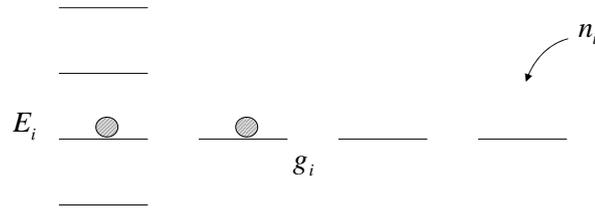
### 1.2.1 Verteilung

Die Fermi-Dirac Statistik entsteht unter der Maßgabe, dass jedes Niveau nur mit maximal einem Teilchen besetzt werden kann, als Folge des Pauli-Verbotes. Betrachten wir ein Niveau mit Energie  $E_i$ , das  $g_i$ -fach entartet ist. Für das erste Teilchen bestehen  $g_i$  Möglichkeiten, für das zweite  $g_i - 1$  etc. Demnach ist die Zahl der Möglichkeiten,  $n_i$  Teilchen auf  $g_i$  Zustände zu verteilen ( $n_i \leq g_i$ ):

$$\frac{g_i!}{(g_i - n_i)!} \quad (1.48)$$

---

<sup>4</sup>In der Quantenstatistik ist mit  $g_i$  immer die Entartung gemeint, während bei der Ableitung der Maxwell-Boltzmann-Statistik mit  $g_i$  eine Wahrscheinlichkeit bezeichnet wurde.



**Abbildung 1.3:** Besetzung der Zustände gemäß Fermi-Dirac-Statistik. Jeder Zustand  $i$  der  $g_i$  fach entartet ist, wird mit  $n_i$  Teilchen besetzt.

D.h. betrachten wir wieder  $N$  Teilchen. Zunächst wollen wir  $n_1$  Teilchen in das Niveau mit Energie  $E_1$  einfüllen. Dafür haben wir wieder:

$$\frac{N!}{n_1!(N - n_1)!} \quad (1.49)$$

Jetzt gibt es zusätzlich die Permutationen für die Aufteilung der Teilchen innerhalb des Niveaus und man bekommt insgesamt

$$\frac{N!}{n_1!(N - n_1)!} \frac{g_1!}{(g_1 - n_1)!} \quad (1.50)$$

Möglichkeiten. Die Wahrscheinlichkeit für eine bestimmte Verteilung  $(n_1, n_2, \dots)$  entsteht durch Division durch  $N!$  und man bekommt schließlich

$$p = \prod_i \frac{g_i!}{n_i!(g_i - n_i)!} \quad (1.51)$$

Um das Maximum zu suchen verwenden wir wieder den Logarithmus als:

$$\ln p = \sum_i (g_i \ln g_i - n_i \ln n_i - (g_i - n_i) \ln (g_i - n_i)) \quad (1.52)$$

Die Randbedingungen hierfür sind wieder Gesamtzahl und Energie des Teilchen-Ensembles:

$$\sum_i n_i = N \quad (1.53)$$

$$\sum_i n_i E_i = U \quad (1.54)$$

Mit Hilfe der Lagrange-Multiplikatoren ist das Maximum zu finden aus:

$$\ln n_i - \ln (g_i - n_i) + \alpha' + \beta' E_i = 0 \quad (1.55)$$

mit der Lösung<sup>5</sup>:

$$\frac{n_i}{g_i - n_i} = e^{-\alpha - \beta E_i} \quad (1.56)$$

bzw.

$$n_i = \frac{g_i}{e^{\alpha + \beta E_i} + 1} \quad (1.57)$$

Hier ist der Koeffizient  $\beta$  wieder über  $k_B T = \frac{1}{\beta}$  definiert. Der Koeffizient  $\alpha$  ergibt sich aus der Gesamtzahl der Teilchen. Dies ist gleichbedeutend mit einer Energie, da bei einer größeren Zahl von Teilchen immer höhere Energie-Zustände besetzt werden müssen. Man definiert dies in der Form einer Energie  $E_F = -\alpha k_B T$ , der **Fermi-Energie**, und erhält die endgültige Form der **Fermi-Dirac-Statistik**:

$$\boxed{n_i = \frac{g_i}{e^{\frac{E_i - E_F}{k_B T}} + 1}} \quad (1.58)$$

## 1.2.2 Das freie Elektronengas

Als einfachste Anwendung der Fermi-Dirac-Statistik sei das freie Elektronengas beschrieben. Die Zahl  $dn$  der Teilchen bei einer Energie  $E_i$  ist gegeben als:

$$dn = \frac{g(E)dE}{e^{\frac{E_i - E_F}{k_B T}} + 1} \quad (1.59)$$

Jetzt ist nur noch die Entartung  $g(E)$  zu bestimmen. Bei einem Festkörper der Länge  $L$  werden die Elektronen als ebene Wellen beschrieben. Durch die Randbedingungen sind für den Wellenvektor dieser Welle immer nur Vielfache von  $\pi/L$  erlaubt.

$$\vec{k} = n_x \frac{\pi}{L} \vec{e}_x + n_y \frac{\pi}{L} \vec{e}_y + n_z \frac{\pi}{L} \vec{e}_z \quad (1.60)$$

Wie bei der Ableitung der Zustandssumme eines idealen Gases werden die Zustände im Phasenraum abgezählt. Bei freien Elektronen müssen die zwei unterschiedlichen Spin-Einstellungen zusätzlich berücksichtigt werden.

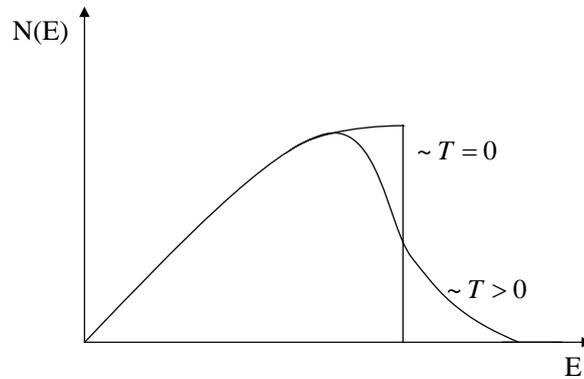
---

<sup>5</sup>Der Übergang von  $\alpha', \beta'$  zu  $\alpha, \beta$  erfolgt analog zu der Ableitung der Maxwell-Boltzmann-Statistik.

$$\tilde{N}(k_{max}) = 2 \frac{1}{8} \frac{4\pi}{3} k_{max}^3 \frac{1}{\left(\frac{\pi}{L}\right)^3} \quad (1.61)$$

Nach deBroglie hat ein Elektron den Impuls  $\hbar k$ . Aus der Energie-Impuls Beziehung eines freien Teilchens  $E = \frac{p^2}{2m}$  ergibt sich:

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (1.62)$$



**Abbildung 1.4:** Besetzung im Energieraum für ein freies Elektronengas.

Ersetzt man die Größe  $k$  in Gl. 1.61 durch die Energie  $E$ , ergibt sich:

$$\tilde{N}(E) = \frac{1}{8} \frac{8\pi}{3} \left( \frac{1}{\hbar^2} 2mE \right)^{3/2} \frac{1}{\pi^3} V \quad (1.63)$$

hier wurde zudem  $L^3$  durch das Volumen  $V$  ersetzt. Die Zahl der Zustände pro Energie-Intervall  $dE$  entspricht der Entartung  $g(E)$ .

$$\frac{d\tilde{N}}{dE} = g(E) = V \frac{1}{8} \frac{8\pi}{3} \frac{3}{2} E^{1/2} \left( \frac{1}{\hbar^2} 2m \right)^{3/2} \frac{1}{\pi^3} \quad (1.64)$$

Diese Entartung bezeichnet man auch als **Zustandsdichte**:

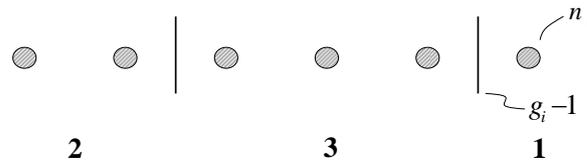
$$g(E) = \frac{8\pi V}{h^3} E^{1/2} (2m^3)^{1/2} \quad (1.65)$$

## 1.3 Quantenstatistik: Bose-Einstein-Verteilung

### 1.3.1 Verteilung

Bei der Bose-Einstein Verteilung betrachten wir wieder ein Niveau mit der Energie  $E_i$ , das  $g_i$ -fach entartet ist. Wie viele Möglichkeiten gibt es jetzt,  $n_i$  Teilchen auf diese  $g_i$  Zustände zu verteilen, *ohne* daß es eine Einschränkung gäbe bezüglich der Zahl der Teilchen pro Zustand.

Betrachten wir zunächst eine Kette von  $n_i$  Teilchen. Diese Teilchen lassen sich auf  $g_i$  Zustände aufteilen, indem wir  $g_i - 1$  Unterteilungen einfügen. Die Gesamtzahl der Möglichkeiten, diese  $n_i$  Teilchen plus die  $g_i - 1$  Unterteilungen anzuordnen, entspricht  $(n_i + g_i - 1)!$ . Nachdem die Teilchen sowie die Unterteilungen selbst un-unterscheidbar sind, muß noch durch  $n_i!$  und durch  $(g_i - 1)!$  geteilt werden. Man erhält als Zahl der Möglichkeiten damit:



**Abbildung 1.5:** Besetzung der Zustände gemäß Bose-Einstein-Statistik

$$\frac{(n_i + g_i - 1)!}{n_i! (g_i - 1)!} \quad (1.66)$$

Die gesamte Wahrscheinlichkeit für die gesamte Verteilungsfunktion ergibt analog zur Argumentation bei der Fermi-Dirac-Verteilung:

$$p = \prod_i \frac{(n_i + g_i - 1)!}{n_i! (g_i - 1)!} \quad (1.67)$$

Das Maximum wird wieder für den Logarithmus gesucht:

$$d(\ln p) = \sum_i [-\ln(n_i + g_i - 1) + \ln n_i] dn_i = 0 \quad (1.68)$$

Die Randbedingungen hierfür sind wieder Gesamtzahl und Energie des Teilchen-Ensembles:

$$\sum_i n_i = N \quad (1.69)$$

$$\sum_i n_i E_i = U \quad (1.70)$$

Mit Hilfe der Lagrange-Multiplikatoren ist das Maximum zu finden aus:

$$-\ln(n_i + g_i - 1) + \ln n_i + \alpha' + \beta' E_i = 0 \quad (1.71)$$

mit der Lösung der **Bose-Einstein-Verteilung**<sup>6</sup>

$$n_i = \frac{g_i}{e^{\alpha + \beta E_i} - 1} \quad (1.72)$$

mit  $\beta = \frac{1}{k_B T}$ . Der Koeffizient  $\alpha$  bestimmt sich wieder aus der Normierung. Bei der allgemeinen Beschreibung der Bose-Einstein Verteilung benutzt man das chemische Potential  $\mu$ , um Normierung auf die Gesamtzahl an Teilchen zu berücksichtigen. Damit bekommt man:

$$n_i = \frac{g_i}{e^{\frac{E_i - \mu}{k_B T}} - 1} \quad (1.73)$$

### 1.3.2 Das Photonengas (Vertiefung)

Bei der Betrachtung von Photonen gilt wieder die Bose-Einstein-Statistik. Allerdings ist die Zahl der Photonen in einem Hohlraum nicht festgelegt, da die Atome an den Wänden des Hohlraums beliebig zusätzliche Photonen abgeben/absorbieren können bei steigender/sinkender Temperatur. Dies läßt sich berücksichtigen, indem man einfach in der Bose-Einstein-Verteilung  $\alpha = 0$  setzt (bzw.  $\mu = 0$ ). Damit wird die Zahl der Photonen im Energie-Intervall  $dE$  zu:

$$dN = \frac{g(E)dE}{e^{\frac{E}{k_B T}} - 1} \quad (1.74)$$

Die Zustandsdichte von Photonen läßt sich wie beim freien Elektronengas ableiten zu:

$$g(E)dE = g(\nu)d\nu = \frac{8\pi V}{c^3} \nu^2 d\nu \quad (1.75)$$

<sup>6</sup>Bei der Ableitung nähert man die Verteilung für große Zahlen  $n_i$  und  $g_i$  wobei die -1 im Ausdruck  $n_i + g_i - 1$  vernachlässigt werden kann.

Die spektrale Energiedichte  $w_\nu d\nu$  ergibt wieder das Planck'sche Strahlungsgesetz:

$$w_\nu d\nu = h\nu dN \frac{1}{V} = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \frac{1}{e^{\frac{h\nu}{k_B T}} - 1} \quad (1.76)$$

Es gilt zu beachten, daß Planck *nicht* auf diesem Weg zu dieser Lösung gelangte. Er hatte in seiner Ableitung zwei fälschliche Annahmen gemacht, die sich kompensiert haben: (i) zum einen hat er die Quantisierungsbedingung für die Energie der Eigenschwingungen der Atome an der Wand des Hohlraums zu  $E = h\nu n$  angesetzt und nicht  $E = h\nu (n + \frac{1}{2})$  und zum (ii) anderen hat er für die Besetzung dieser Niveaus die Maxwell-Boltzmann-Statistik verwendet und nicht direkt schon die Bose-Einstein-Statistik.

Planck ging von den Atomen an der Wand aus für seine Quantisierungsbedingung. Die Energiedichte in dem Hohlraum wird aber erst richtig beschrieben als Folge der Besetzung von Zuständen ebener Wellen durch einzelne Photonen.

### 1.3.3 Das ideale Gas in der Quantenstatistik

Die Zahl der Teilchen eines idealen Gases im Energie-Intervall  $dE$  ergibt sich aus der Entartung und der Besetzungs-Wahrscheinlichkeit. Da Atome und Moleküle oftmals ganzzahligen Spin besitzen, verwenden wir die Bose-Einstein-Statistik:

$$dN = V \frac{4\pi (2m^3)^{1/2}}{h^3} \frac{E^{1/2}}{e^\alpha e^{\frac{E}{k_B T}} - 1} dE \quad (1.77)$$

mit der Zustandssumme  $Z$  des idealen Gases gemäß 1.34 und der Substitution  $x = \frac{E}{k_B T}$  kann man schreiben:

$$N = \frac{2Z}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \frac{x^{1/2}}{e^{\alpha+x} - 1} dx \quad (1.78)$$

Der Nenner des Integrandes läßt sich entwickeln zu:

$$(e^{\alpha+x} - 1)^{-1} = e^{-\alpha} (e^{-x} + e^{-\alpha-2x} + \dots) \quad (1.79)$$

Damit wird

$$N = Z e^{-\alpha} \left( 1 + \frac{1}{2^{3/2}} e^{-\alpha} + \dots \right) \quad (1.80)$$

In analoger Weise bekommt man für die Gesamtenergie  $U$

$$U = \int_0^\infty E dn = \frac{2Zk_B T}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \frac{x^{3/2}}{e^{\alpha+x} - 1} dx = \frac{3}{2} k_B T Z e^{-\alpha} \left( 1 - \frac{1}{2^{5/2}} e^{-\alpha} + \dots \right) \quad (1.81)$$

mit dem führenden Term aus Gl. 1.80 für  $e^{-\alpha} = \frac{N}{Z}$  bekommen wir schließlich:

$$U = \frac{3}{2} N k_B T \left( 1 - \frac{1}{2^{5/2}} \frac{N}{Z} + \dots \right) \quad (1.82)$$

Man erkennt, daß der führende Term identisch zu dem der Maxwell-Boltzmann-Statistik ist. Der Term erster Ordnung ist proportional zu  $N/Z$ . Mit der Verwendung der Zustandssumme  $Z$  nach Gl. 1.34 skaliert  $N/Z$  wie:

$$\frac{N}{Z} \propto \frac{N}{V} T^{-3/2} = n T^{-3/2} \quad (1.83)$$

d.h. bei kleiner Dichte und großer Temperatur sind Maxwell-Boltzmann-Statistik und Bose-Einstein-Statistik nahezu identisch. Erst bei niedrigen Temperaturen bzw. hohen Dichten wird die Gesamtenergie niedriger, als man es von der Maxwell-Boltzmann-Statistik erwarten würden.

Man erkennt, daß die Bose-Einstein-Statistik für Bosonen und die Fermi-Dirac-Statistik für Fermionen die einzigen korrekten Statistiken für die Beschreibung eines Teilchen-Ensembles darstellen. Die Maxwell-Boltzmann-Statistik ist allerdings eine gute Näherung, falls die Dichten klein und die Temperaturen hoch bleiben.

# Kapitel 2

## Festkörperphysik

Bei der Beschreibung von Festkörpern muß ein Vielteilchenproblem gelöst werden. Die Art der Kopplung einer großen Zahl von Atomen bestimmt die makroskopischen Eigenschaften eines Festkörpers, wie spezifische Wärme, optische Eigenschaften etc. Als Festkörper kann man geordnete Kristalle, Polymere oder Gläser betrachten. In diesem Kapitel sollen allerdings nur die Grundprinzipien der Physik von Kristallen diskutiert werden.

### 2.1 Kristallgitter

#### 2.1.1 Der reale Raum

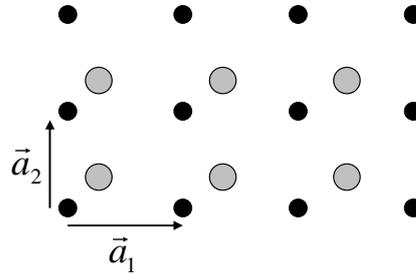
Ein Kristall ist ein Festkörper, der bestimmte Symmetrieeigenschaften besitzt. Setzt man sich auf einen Punkt im Kristallgitter und betrachtet die Umgebung, so erkennt man eine periodische Anordnung der Atome. Dies sei im *zweidimensionalen* illustriert am Beispiel des einfachen quadratischen Gitters. Die sogenannten Gittervektoren, die dieses Gitter aufspannen sind  $\vec{a}_1$  und  $\vec{a}_2$  (siehe Abb. 2.1) und bilden eine **Einheitszelle**. Das gesamte Gitter kann aufgebaut werden, indem diese Einheitszelle jeweils um ein ganzzahliges Vielfaches der Gittervektoren in x- und y-Richtung verschoben wird.

Vergleicht man zwei Orte  $\vec{r}$  und  $\vec{r}'$  in diesem Gitter, so erscheint die Umgebung identisch, wenn gilt

$$\vec{r}' = \vec{r} + \vec{a}_1 n_1 + \vec{a}_2 n_2 \quad n_1, n_2 = 0, 1, 2, \dots \quad (2.1)$$

Dies bezeichnet man als **Translationssymmetrie** bezüglich eines Vektors  $\vec{T}$ . Dieser ist im zwei-dimensionalen:

$$\vec{T} = \vec{a}_1 n_1 + \vec{a}_2 n_2 \quad n_1, n_2 = 0, 1, 2, \dots \quad (2.2)$$



**Abbildung 2.1:** Gittervektoren eines 2-dimensionalen quadratischen Gitters. Die Basis besteht aus zwei Atomen (gefüllte und offene Kreise)

Im 3-dimensionalen entsprechend:

$$\vec{T} = \vec{a}_1 n_1 + \vec{a}_2 n_2 + \vec{a}_3 n_3 \quad n_1, n_2, n_3 = 0, 1, 2, \dots \quad (2.3)$$

Das Volumen einer Einheitszelle im dreidimensionalen ist:

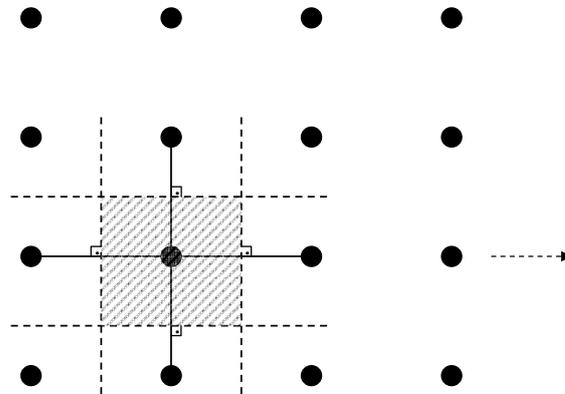
$$V = |\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)| \quad (2.4)$$

Neben der Translationssymmetrie gibt es noch Punktsymmetrien, die Drehungen und Spiegelungen bezeichnen. Das Gitter in Abb. 2.1 ist z.B. nur symmetrisch bezüglich der trivialen Drehung um  $360^\circ$ .

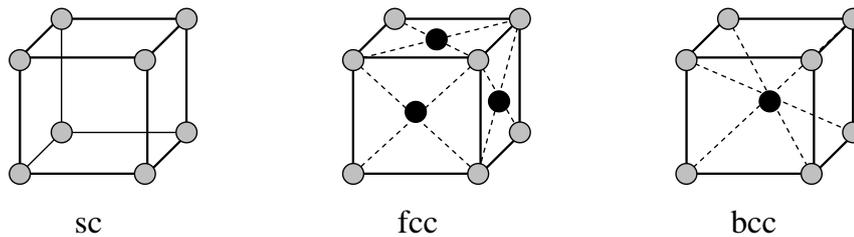
Die kleinste mögliche Einheits-Zelle entsteht wie folgt: Zunächst zeichnet man die Verbindungsgeraden zwischen einem Atom und seinen nächsten Nachbarn. Anschließend konstruiert man die Mittelebenen (3-dim) bzw. Mittelsenkrechten (2-dim) (siehe Abb. 2.2). Das kleinste Volumen, das von diesen Ebenen umschlossen wird, ist die **primitive Einheitszelle** oder auch **Wigner-Seitz-Zelle**. Sie enthält genau ein Atom.

Insgesamt gibt es 7 Gittertypen (triklin, monoklin, orthorhombisch, tetragonal, kubisch, rhomboedrisch und hexagonal), aus denen man 14 unterschiedliche Einheitszellen konstruieren kann. Die wichtigsten sind hierbei die drei Möglichkeiten ein kubisches Gitter aufzubauen, wie in Abb. 2.3 gezeigt. Man unterscheidet **sc** simple cubic, **fcc** face-centered-cubic, **bcc** body-centered cubic. Nur die Einheitszelle des sc-Gitter entspricht auch einer primitiven Einheitszelle. Einige Eigenschaften dieser kubischen Gitter sind in Tab. 2.1 zusammengefasst. Der Ort der nächsten Nachbarn in den drei Gittern ist in Abb. 2.21 illustriert.

Neben der periodischen Anordnung der Atome in den kubischen Gittern, können jetzt noch zusätzliche Atome Bestandteile des Kristalls sein. Dies bezeichnet man als Basis. So besitzt der NaCl-Kristall eine Basis bestehend aus zwei Atomen (Na und Cl) und entsteht aus einem fcc-Gitter (Kantenlänge



**Abbildung 2.2:** Konstruktion der primitiven Einheitszelle, der Wigner-Seitz-Zelle.



**Abbildung 2.3:** Kubische räumliche Gitter. **sc** simple cubic, **fcc** face-centered-cubic, **bcc** body-centered cubic.

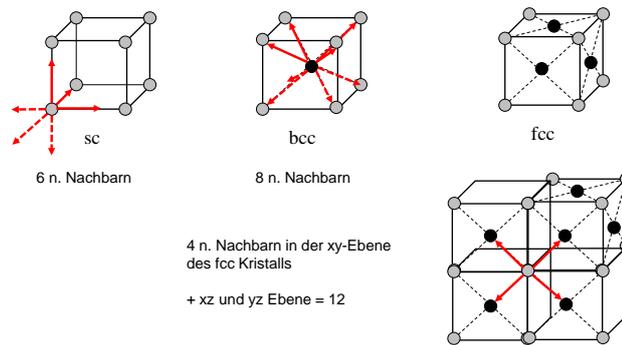
*a)* von Na Atomen mit einem Basisvektor  $(a/2,0,0)$  für den Ort des Cl Atoms. D.h. an jedem Atom des fcc-Gitter fügt man die Basis ein und erhält somit einen kompletten NaCl Kristall.

Eine prominente Struktur ist die Diamant-Struktur (Diamant, Silizium Germanium etc.), die aus einem kubischen fcc-Gitter (Kantenlänge  $a$ ) besteht, bei dem die Basis zwei Atome enthält. Eines am Ursprung und das zweite am Ort  $(1/4a,1/4a,1/4a)$ , wie in Abb. 2.5 gezeigt.

In diesem Sinne ergibt sich eine Kristallstruktur immer aus

$$\text{Struktur} = \text{Basis} + \text{Gitter} \tag{2.5}$$

	sc	bcc	fcc
Atome	1	2	4
Volumen	$a^3$	$a^3$	$a^3$
Volumen Wigner-Seitz-Zelle	$a^3$	$\frac{1}{2}a^3$	$\frac{1}{4}a^3$
Zahl der nächsten Nachbarn	6	8	12

**Tabelle 2.1:** Einheitszelle**Abbildung 2.4:** Position der nächsten Nachbarn in der sc, bcc und fcc Struktur.

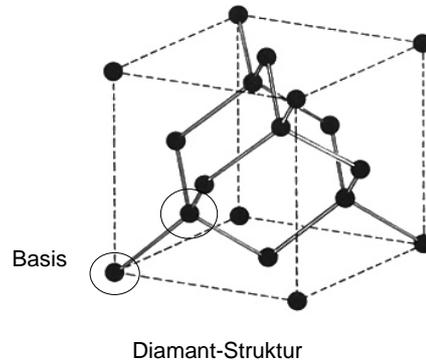
## 2.1.2 Der reziproke Raum

Wie bestimmt man jetzt die Struktur eines gegebenen Festkörpers? Hierzu verwendet man die Beugung von Röntgen-Strahlen, Elektronenstrahlen oder Neutronenstrahlen. Die Art der Sondenteilchen (Elektronen, Photonen, Neutronen) bestimmt die Art der Wechselwirkung und der Eindringtiefe der Strahlung. Die Wellenlänge ist entweder direkt die Photonen-Wellenlänge bzw. die deBroglie Wellenlänge bei Elektronen und Neutronen.

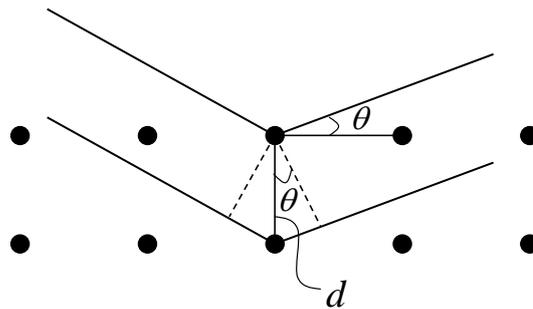
### Reziproke Gittervektoren

Die Beugung einer Welle an einem Kristall führt dann zu einem Beugungsreflex, wenn sich die Streueignisse an den einzelnen Atomen konstruktiv überlagern. Die Bedingung hierfür ist in Abb. 2.6 illustriert. Für die Streuung an parallelen Ebenen von Gitteratomen muß die sog. **Bragg-Bedingung** erfüllt sein:

$$\boxed{2d \sin \Theta = n\lambda} \quad (2.6)$$



**Abbildung 2.5:** Die Diamantstruktur besteht aus einem kubischen fcc-Gitter mit einer Basis aus zwei Atomen  $(0,0,0)$  und  $(1/4a, 1/4a, 1/4a)$ .



**Abbildung 2.6:** Braggbedingung für die konstruktive Interferenz für die Beugung von Röntgenstrahlen an einem Kristallgitter.

$d$  bezeichnet den Abstand der Atomenebenen untereinander. Die Intensität des Beugungsreflexes hängt jetzt ab von der Anzahl an Streuereignissen, die zu einem bestimmten Beugungsmuster beitragen. Dieses Problem läßt sich sehr elegant lösen, indem man zum einen das Gitter selbst als Fouriertransformierte darstellt und die Interferenz an zwei Punkten, die um den Vektor  $\vec{r}$  getrennt sind, ganz allgemein formuliert:

- *Fouriertransformierte des Gitters - der reziproke Raum*

Hierzu ist es sinnvoll, die räumliche Verteilung der Atome durch eine Fourier-Reihe auszudrücken. Zunächst besagt die Translationssymmetrie des Kristalls, daß für die Atomdichte  $n(\vec{r})$  gilt:

$$n(\vec{r} + \vec{T}) = n(\vec{r}) \quad (2.7)$$

Im Beispiel einer linearen Kette, sei der Abstand der Atome  $a$ . Es ist deshalb sinnvoll  $n(x)$  als komplexe Fourier-Reihe zu schreiben, die der Periodizität Rechnung trägt (siehe Abb. 2.9):

$$n(x) = \sum c_p e^{i2\pi p \frac{x}{a}} \quad p = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (2.8)$$

Die Koeffizienten  $c_p$  sind komplex, damit  $n(x)$  eine reelle Größe bleibt.  $p$  ist eine ganze Zahl mit der sich ein sog. **reziproker Gittervektor**  $\vec{G}$  (in einer Dimension  $\vec{e}_x$ ) definieren läßt als:

$$\frac{2\pi}{a} p \vec{e}_x = \vec{G} \quad (2.9)$$

Im *drei-dimensionalen* schreibt sich Gl. 2.8 als:

$$n(\vec{r}) = \sum_G n_g e^{i\vec{G}\vec{r}} \quad (2.10)$$

- *Beugung einer Welle mit Wellenvektor  $\vec{k}$*

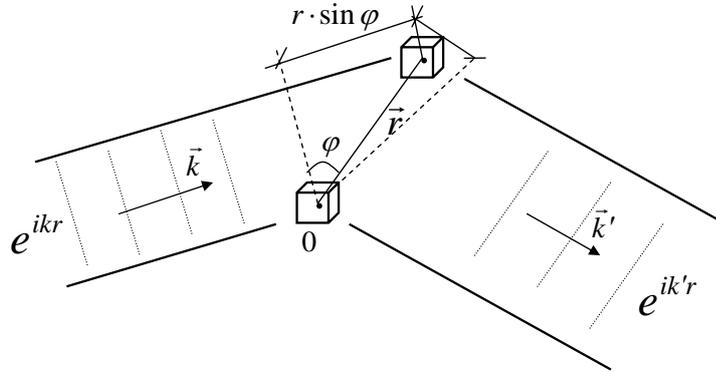
Die Intensität eines Beugungsreflexes hängt von der Phasenverschiebung zwischen streuenden Volumina ab. Die beiden Volumina seien durch den Vektor  $\vec{r}$  getrennt, wobei die einfallende Welle den Wellenvektor  $\vec{k}$  und die gestreute den Wellenvektor  $\vec{k}'$  besitzt.

Vergleicht man die Volumina am Ort 0 und am Ort  $\vec{r}$ , so ist die Phasenverschiebung einer ebenen Welle ( $e^{i\vec{k}\vec{x}}$ ) auf der Seite der einfallenden Welle  $\vec{k}\vec{r}$  und der ausfallenden Welle  $-\vec{k}'\vec{r}$  (siehe Abb. 2.7). Damit ergibt sich die Amplitude des gestreuten Lichtes aus der Überlagerung von Streuereignissen an Volumina integriert über den ganzen Kristall:

$$F = \int n(\vec{r}) e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\vec{r}} dV \quad (2.11)$$

Wenn wir setzen  $-\Delta\vec{k} = \vec{k} - \vec{k}'$ , so bekommen wir:

$$F = \int n(\vec{r}) e^{-i\Delta\vec{k}\vec{r}} dV \quad (2.12)$$



**Abbildung 2.7:** Phasenverschiebung für die Überlagerung der Streuung einer ebenen Welle an Volumina am Ort 0 und  $\vec{r}$ .

Durch unseren Fourier-Ansatz wird  $n(\vec{r})$  ersetzt durch Gl. 2.10 und man erhält:

$$F = \sum_G \int n_g e^{i\vec{G}\vec{r}} e^{-i\vec{\Delta}k\vec{r}} dV \quad (2.13)$$

D.h. die Amplitude der gestreuten Welle ist nur dann von Null verschieden, falls das Argument der komplexen Exponentialfunktion zu Null wird, da ansonsten sich die entsprechenden trigonometrischen Funktionen bei der Integration über das Volumen weg mitteln. D.h. die Beugungsbedingung läßt sich schreiben als:

$$\boxed{\vec{\Delta}k = \vec{G}} \quad (2.14)$$

Die Lage der Beugungsreflexe, z.B. auf einer Photoplatte bei der Durchstrahlung eines Kristalls mit ebenen Wellen, läßt auf der Basis der Beugungsbedingung wie folgt ableiten. Hierzu verwendet man die sog. **Ewald-Konstruktion** (siehe Abb. 2.8). Mit dem Wellenvektor  $\vec{k}$  der einfallenden Strahlung, dessen Spitze an einem Punkt im reziproken Raum endet, wird eine Kugel in den reziproken Raum mit Radius  $|\vec{k}|$  einbeschrieben. Nachdem die Streuung elastisch erfolgt, muß gelten:

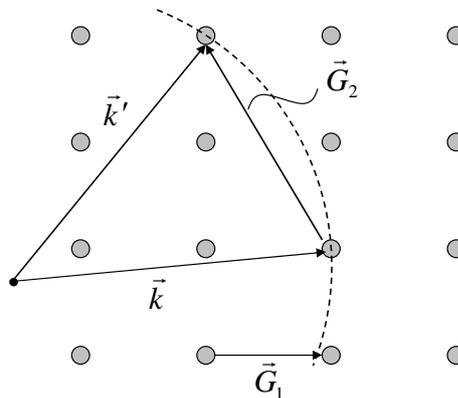
$$|\vec{k}| = |\vec{k}'| \quad (2.15)$$

d.h. auch die Spitze des Wellenvektors der gestreuten Strahlung  $\vec{k}'$  muß auf der Oberfläche dieser Kugel liegen. Die Beugungsbedingung ist dann

erfüllt, wenn ein Gitterpunkt des reziproken Raumes auf der Oberfläche der Ewald-Kugel zu liegen kommt. Nachdem die Spitze von  $\vec{k}$  auf einem reziproken Gitterpunkt liegt, und ein zweiter reziproker Gitterpunkt auf der Ewaldkugel liegt, erfüllt sich automatisch die Bedingung (äquivalent zu Gl. 2.14):

$$\vec{k}' = \vec{k} + \vec{G} \quad (2.16)$$

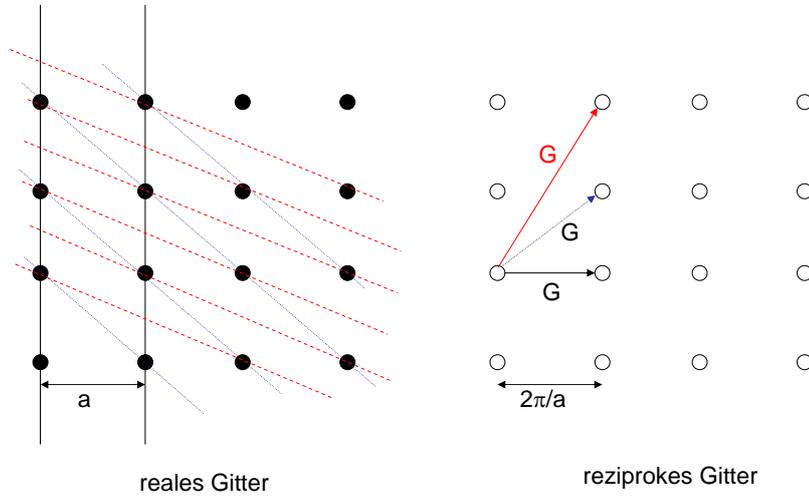
d.h. die Kristallebenen, die zu dem Beugungsreflex beitragen, sind diejenigen, die durch den reziproken Gittervektor  $\vec{G}$  definiert sind. Die einen Gitterpunkt schneiden, ergeben die Wellenvektoren  $\vec{k}'$  der gebeugten Welle, da automatisch die Bedingung erfüllt ist.



**Abbildung 2.8:** Ewald-Konstruktion zur Bestimmung der Richtungen der Beugungsreflexe. Mit dem Wellenvektor  $\vec{k}$  der einfallenden Strahlung wird eine Kugel in den reziproken Raum eingeschrieben. Alle Punkte auf der Oberfläche dieser Kugel, die einen Gitterpunkt schneiden, ergeben die Wellenvektoren  $\vec{k}'$  der gebeugten Welle.

Wie sind jetzt der reale Raum und der reziproke Raum untereinander verknüpft? Dies ist in Abb. 2.9 illustriert. Die Beugung an einer Kristallebene wird mit einem reziproken Gittervektor beschrieben. Dieser steht senkrecht zu der Kristallebene. Seine Länge ist umgekehrt proportional zu dem Abstand der Ebenen untereinander.

Die Vektoren, die den realen Raum aufspannen  $\vec{a}_1$ ,  $\vec{a}_2$  und  $\vec{a}_3$  lassen sich in die Vektoren  $\vec{G}$  umrechnen, die den **reziproken Raum** aufspannen  $\vec{b}_1$ ,  $\vec{b}_2$  und  $\vec{b}_3$  ( $\vec{G} = \vec{b}_1 + \vec{b}_2 + \vec{b}_3$ ):



**Abbildung 2.9:** Realer und reziproker Raum. Eine Kristallebene ist durch einen reziproken Gittervektor repräsentiert, der senkrecht auf dieser Ebene steht.

$$\vec{b}_1 = 2\pi \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\vec{a}_1 (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)} \quad (2.17)$$

$$\vec{b}_2 = 2\pi \frac{\vec{a}_3 \times \vec{a}_1}{\vec{a}_1 (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)} \quad (2.18)$$

$$\vec{b}_3 = 2\pi \frac{\vec{a}_1 \times \vec{a}_2}{\vec{a}_1 (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)} \quad (2.19)$$

### Strukturfaktor und Formfaktor (Vertiefung)

Bei der Betrachtung der Beugung haben wir zunächst nur einfache kubische Gitter (sc) betrachtet. Bei komplizierteren Kristallen können in der Elementarzelle mehrere Atome vorliegen. Die Streuung von Röntgenlicht erfolgt an allen Atomen zugleich genauer gesagt an den Elektronen dieser Atome. Beide Tatsachen werden durch den Strukturfaktor der Elementarzelle und den Formfaktor der einzelnen Atome berücksichtigt. Die Beugung an  $N$  Zellen des Gitters wird beschrieben durch:

$$F = N \int_{Zelle} dV n(\vec{r}) e^{-i\vec{\Delta} \cdot \vec{kr}} = N \int_{Zelle} dV n(\vec{r}) e^{-i\vec{G} \cdot \vec{r}} \quad (2.20)$$

Für einen bestimmten Beugungsreflex, der durch den reziproken Gittervektor  $\vec{G}$  gekennzeichnet ist ergibt sich:

$$F_{\text{Reflex } G} = N \int_{\text{Zelle}} dV n(\vec{r}) e^{-i\vec{G}\vec{r}} = N S_G \quad (2.21)$$

$S_G$  bezeichnet man als **Strukturfaktor** dieser Zelle für eine Beugung gemäß  $\vec{G}$ :

$$S_G = \int_{\text{Zelle}} dV n(\vec{r}) e^{-i\vec{G}\vec{r}} \quad (2.22)$$

Betrachten wir ein einzelnes Atom  $j$  in der Zelle, so findet die Streuung an den Elektronen dieser Atome statt, die sich im Abstand  $\rho$  vom Atom  $j$  befinden. Analog zum Strukturfaktor der Zelle definiert man einen Formfaktor  $f_j$  für die Atome selbst:

$$S_G = \sum_{\text{Atome } j} \int_{\text{Zelle}} dV n(\vec{r}) e^{-i\vec{G}\vec{\rho}} e^{-i\vec{G}\vec{r}_j} = \sum_j f_j e^{-i\vec{G}\vec{r}_j} \quad (2.23)$$

Als Beispiel nehmen wir einen bcc-Kristall mit den beiden Atomen  $\vec{r}_0 = a(0, 0, 0)$  und  $\vec{r}_1 = a(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ . Für den Beugungsreflex gilt ganz allgemein:

$$\vec{G} = \frac{2\pi}{a} \left( n_1 \vec{b}_1 + n_2 \vec{b}_2 + n_3 \vec{b}_3 \right) \quad (2.24)$$

Setzen wir dies ein, so ergibt sich als Strukturfaktor eines bcc-Gitters:

$$S = f_0 + f_1 e^{-i\pi(n_1+n_2+n_3)} \quad (2.25)$$

D.h. wenn die Summe der Indizes  $n_1$ ,  $n_2$  und  $n_3$  ungerade ist, so ergibt sich  $S = 0$ . Falls diese Summe gerade ist, so ergibt sich  $S = f_0 + f_1 = 2f$ .

## Brillouin-Zonen

Die Beugungsbedingung gilt für alle Wellen, auch Materiewellen mit denen z.B. Elektronen in einem Material beschrieben werden können. Bei einer bestimmten Wellenlänge werden auch diese Teilchen an dem Kristallgitter gebeugt. Diese charakteristischen Bedingungen beschreibt man mit Brillouin-Zonen.

Genauso wie im Ortsraum läßt sich auch im reziproken Raum wieder eine primitive Einheitszelle konstruieren. Alle Wellenvektoren, die auf der Begrenzung dieser Einheitszelle liegen erfüllen wieder die Beugungsbedingung. Nachdem die Streuung elastisch erfolgt und damit der Betrag von  $\vec{k}$  und  $\vec{k}'$  gleich bleibt gilt:

$$\vec{k} + \vec{G} = \vec{k}' \quad (2.26)$$

$$(\vec{k} + \vec{G})^2 = (\vec{k}')^2 \quad (2.27)$$

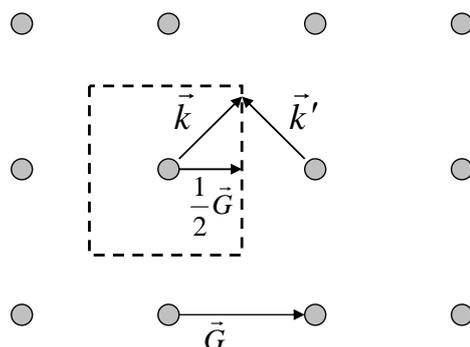
Dies läßt sich weiter auflösen unter der Maßgabe, daß das Ergebnis für  $\vec{G}$  auch für  $-\vec{G}$  gelten soll.

$$2\vec{k} \cdot \vec{G} = G^2 \quad (2.28)$$

Teilt man Gl. 2.28 durch 4 so bekommt man:

$$\vec{k} \left( \frac{1}{2} \vec{G} \right) = \left( \frac{1}{2} \vec{G} \right)^2 \quad (2.29)$$

Diese Bedingung für konstruktive Interferenz läßt sich grafisch veranschaulichen, wie in Abb. 2.10 demonstriert. Wie bei der Konstruktion der Wigner-Seitz-Zelle des reziproken Raumes verbindet man jetzt einen Gitterpunkt am Ursprung mit den benachbarten Gitterpunkten im reziproken Raum. Wieder bildet man die Mittelsenkrechten (bzw. Mittelebenen im drei-dimensionalen). Alle Vektoren  $\vec{k}$ , die auf dieser Mittelsenkrechten enden, gehören zu einem Beugungsreflex in die Richtung  $\vec{k}'$ . Die Mittelsenkrechten bzw. Ebenen umschließen wieder ein Volumen im reziproken Raum, die **Brillouin-Zone**. Das kleinste mögliche Volumen bezeichnet man als erste Brillouin-Zone.



**Abbildung 2.10:** Erste Brillouin-Zone als Wigner-Seitz Zelle des reziproken Raums.

Die Brillouin-Zone bezeichnet die primitive Einheitszelle im reziproken Raum ( $\vec{k}$ ) oder Impulsraum ( $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ ). Nachdem, wie im Ortsraum, alle physikalischen Größen bei einer Translation um einen reziproken Gittervektor  $\vec{G}$  gleich bleiben sollen, muß, zum Beispiel, die Beschreibung einer Elektronen-Welle mit Wellenvektor  $\vec{k}$  und Wellenvektor  $\vec{k} \pm \vec{G}$  identisch sein. Dies wird weiter unten genauer diskutiert.

### 2.1.3 Experimentelle Beugungsmethoden

Zur Bestimmung der Kristallstruktur wird in der Regel Röntgen-Beugung benutzt. Hierfür gibt es drei mögliche Verfahren, die man an der Skizze der Ewaldkugel illustrieren kann (siehe Abb. 2.8). Eine Röntgenquelle durchstrahlt in einer Richtung  $\vec{k}$  den Kristall, die Beugungsreflexe in Richtung  $\vec{k}'$  werden auf einer Photoplatte abgebildet. Sind die Kristallebenen an denen gestreut, wird um den Winkel  $\vartheta$  gegenüber  $\vec{k}$  verkippt, so entsteht der Beugungsreflex bei passender Wellenlänge unter dem Winkel  $2\vartheta$ .

- **Laue-Verfahren**

Beim Laue-Verfahren benutzt man eine spektral breite Röntgenquelle (Bremsstrahlung, Synchrotronstrahlung). Dadurch haben die Röntgenphotonen verschiedene Wellenlängen bzw. Wellenvektoren  $\vec{k}$ . Dies entspricht einer Ewaldkugel mit *variablem Radius*. Beginnt man den Wellenvektor in der Ewaldkugel sukzessive zu erhöhen, treten nach und nach einzelne Punkte des reziproken Gitters durch die Oberfläche der Ewaldkugel. In diese Richtungen beobachtet man dann einen Reflex auf der Photoplatte.

- **Drehkristall**

Bei der Drehkristall-Methode verwendet man einen monochromatischen Röntgenquelle und dreht den Kristall. Dies entspricht einer Drehung der Ewaldkugel um die Spitze von  $\vec{k}$ . Bei dieser Drehung um den Winkel  $\vartheta$  bezüglich  $\vec{k}$  treten nach und nach einzelne Punkte des reziproken Gitters durch die Oberfläche der Ewaldkugel. In diese Richtungen beobachtet man dann einen Reflex, der von einem lokalen Detektor erfasst wird. Damit der Ort des Detektors und die Richtung des Beugungsreflexes übereinstimmen, muß beim Drehen des Kristalls um den Winkel  $\vartheta$  auch gleichzeitig der Detektor zum Winkel  $2\vartheta$  weiter bewegt werden. Dieses Verfahren wird häufig bei der Verwendung von Neutronen als Sondenteilchen benutzt, da der Nachweis der Beugungsreflexe über eine Photoplatte etc. nicht möglich ist.

- **Debye-Scherrer-Verfahren**

Das Debye-Scherrer Verfahren ist schließlich eine Methode, bei der als Probe ein Pulver verwendet wird. Dies entspricht der Überlagerung von Beugungsmustern beliebig orientierter Kristallite. Diejenigen Kristallite, die die richtige Orientierung bezüglich  $\vec{k}$  besitzen, tragen zur konstruktiven Interferenz bei. Nachdem die Orientierung bezüglich einer Rotation um  $\vec{k}$  beliebig sein kann, entsteht kein einzelner Beugungsreflex, sondern ein Beugungsring mit Öffnungswinkel  $2\vartheta$ .

### Temperaturabhängigkeit der Beugungsreflexe

Bei der Beschreibung der Beugung von Röntgenstrahlen an Kristallen entstand die Frage, ob es überhaupt möglich sei, ein scharfes Bild zu bekommen, da bei endlichen Temperaturen die Schwingungen der Atome um ihre Ruhelage jegliche konstruktive Interferenz verhindern. Dies ist allerdings nicht der Fall, wie im folgenden gezeigt wird. Die Amplitude der gebeugten Welle in einem Beugungsreflex ist zunächst:

$$F = \int dV n(\vec{r}) e^{-i\vec{G}\vec{r}} \quad (2.30)$$

d.h. die Streuung an  $N$  Zellen kann man auch zusammenfassen als:

$$F = N \int_{1 \text{ Zelle}} dV n(\vec{r}) e^{-i\vec{G}\vec{r}} \quad (2.31)$$

Das Integral läuft hier nur noch über eine Einheitszelle. Jetzt nehmen wir an, daß die Atome in einer Zelle um ihre Ruhelage thermisch schwingen mit einer Amplitude  $\vec{u}$ . d.h.

$$\vec{r} \rightarrow \vec{r} + \vec{u} \quad (2.32)$$

Für diese thermischen Auslenkung  $\vec{u}$  gilt im zeitlichen Mittel  $\langle u \rangle = 0$ . Mit dieser Substitution ergibt sich:

$$F = N \int_{1 \text{ Zelle}} dV n(\vec{r}) e^{-i\vec{G}\vec{r}} e^{-i\vec{G}\vec{u}} \quad (2.33)$$

Die Messung des Beugungsmuster erfolgt über einen endlichen Zeitraum und entspricht einer zeitlichen und räumlichen Mittelung von  $\vec{u}$ . Mit der Entwicklung der Exponentialfunktion für kleine Argumente kann man die zeitliche Mittelung schreiben als:

$$e^{-i\vec{G}\vec{u}} = 1 - \underbrace{i\langle\vec{G}\vec{u}\rangle}_{=0} - \frac{1}{2} \underbrace{\langle(\vec{G}\vec{u})^2\rangle}_{\frac{1}{3}\langle u^2\rangle G^2} + \dots \quad (2.34)$$

Die *geometrische* Mittelung von  $(\vec{G}\vec{u})^2 = (|G||u|\cos\Theta)^2$  liefert den Faktor  $\frac{1}{3}$ . Diese Entwicklung ist identisch mit der Entwicklung von  $e^{-\frac{1}{6}\langle u^2\rangle G^2}$ . Dieser Faktor berücksichtigt den Einfluss der thermischen Schwankungen von  $\vec{r}$  auf die Amplitude des Beugungsreflexes. Die Intensität entspricht dem Quadrat der Amplitude und man bekommt den sog. **Debye-Waller-Faktor** als:

$$\boxed{e^{-\frac{1}{3}\langle u^2\rangle G^2}} \quad (2.35)$$

D.h. die Breite der Beugungsreflexe wird durch die thermische Auslenkung *nicht* beeinträchtigt, sondern nur deren Intensität. Dieser Effekt wird stärker bei größeren Gittervektoren  $\vec{G}$  und der größeren Auslenkung der Atome bei höheren Temperaturen ( $\langle u^2 \rangle$ ). Die explizite Temperaturabhängigkeit läßt sich aus dem Gleichverteilungssatz der Thermodynamik ableiten. Dabei ist zunächst die potentielle Energie eines Oszillators:

$$\frac{1}{2}C\langle u^2 \rangle = \frac{1}{2}M\omega^2\langle u^2 \rangle \quad (2.36)$$

mit  $C$  der Federkonstante bzw.  $M$  und  $\omega$  der Masse und Frequenz der Schwingung. Diese potentielle Energie eines 1-dim Oszillators ist nach dem Gleichverteilungssatz  $\frac{1}{2}k_B T$  bzw. für einen drei-dimensionalen Oszillator  $\frac{3}{2}k_B T$ . Damit läßt sich dann die Auslenkung  $\langle u^2 \rangle$  in eine Temperatur umrechnen und man bekommt:

$$\boxed{e^{-k_B T \frac{M}{\omega^2} G^2}} \quad (2.37)$$

D.h. mit größerer Temperatur wird der Beugungsreflex zu einem bestimmten  $G$  immer blasser.

Die Breite eines Beugungsreflexes wird nur von der makroskopischen Ausdehnung des Kristalls bestimmt und wird deshalb auch vornehmlich ausgenutzt, um die Größe von Kristalliten in Nanocomposite-Materialien zu bestimmen.

## 2.2 Bindungstypen von Kristallen

Die Bindung der Atome in einem Kristall erfolgt analog zur Beschreibung der Bindung in Molekülen. Man unterscheidet folgende Typen von Kristallbindungen:

- **Edelgase, Ar, Xe,...**

Edelgaskristalle können nur bei sehr tiefen Temperaturen gebildet werden, da Edelgasatome wegen ihrer abgeschlossenen Elektronenschalen keine kovalente Bindungen ausbilden können. Die Bindung wird durch die van-der-Waals-Wechselwirkung vermittelt (siehe Skript Physik III), die von der Polarisierbarkeit  $\alpha$  der Atome abhängt. Die potentielle Energie zweier induzierter Dipole im Abstand  $R$  ist:

$$E_{pot} = -C \frac{\alpha^2}{R^6} \quad (2.38)$$

Das Bindungspotential muß noch zusätzlich die abstoßende Wechselwirkung aufgrund des Pauli-Verbotes mit einem Term proportional zu  $1/R^{12}$  berücksichtigen. Man bekommt das **Lennard-Jones-Potential** in der Form:

$$V(R) = \frac{a}{R^{12}} - \frac{b}{R^6} \quad (2.39)$$

mit den entsprechend tabellierten Koeffizienten  $a$  und  $b$ .

- **Ionenkristalle, NaCl**

Bei Ionenkristallen ist die elektrostatische Wechselwirkung maßgeblich, da am Beispiel eines NaCl Kristalls, die Natriumatome als  $\text{Na}^+$  und die Chloratome als  $\text{Cl}^-$  vorliegen. Die potentielle Energie zweier Atome  $i$  und  $j$  mit Ladung  $q$  im Abstand  $r_{ij}$  in einem NaCl-Kristall ist demnach:

$$E_{pot,ij} = C e^{-\frac{r_{ij}}{\rho}} \pm \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q^2}{r_{ij}} \quad (2.40)$$

Der erste Term beschreibt wieder die Pauli-Abstoßung mit einer Reichweite  $\rho$ . Nachdem diese Abstoßung nur für die nächsten Nachbarn im Abstand  $R$  relevant ist, kann man für die potentielle Energie schreiben:

$$E_{pot,ij} = \begin{cases} C e^{-\frac{R}{\rho}} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q^2}{R} & \text{nächste Nachbarn} \\ \pm \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q^2}{p_{ij}R} & \text{Kristall} \end{cases} \quad (2.41)$$

mit  $p_{ij}$  ganzen Zahlen, die die Symmetrie des Gitter beschreiben. Als Potential bekommt man nach Summation über alle Nachbarn damit:

$$V = C e^{-\frac{R}{\rho}} + \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 R} \sum_j \frac{\pm 1}{p_{ij}} \quad (2.42)$$

Hierbei bezeichnet man

$$\boxed{\sum \frac{\pm 1}{p_{ij}}} \quad (2.43)$$

als **Madelung Konstante**, deren Berechnung schwierig sein kann, da der Ausdruck  $\sum_i \frac{1}{p_{ij}}$  nicht grundsätzlich konvergiert.

- **Kovalente Kristalle, Si, C...**

Bei kovalenten Kristallen erfolgt die Bindung der Atome untereinander durch die symmetrische bzw. antisymmetrische Überlagerung der atomaren Wellenfunktionen analog zur Bildung des  $H_2$  Moleküls (siehe Skript Physik III). Durch die endliche Elektronendichte zwischen den Atomen wird die abstoßende Wirkung der Atomkerne reduziert und eine Bindung entsteht.

- **Metallbindung**

Bei der metallischen Bindung ist der Anteil der frei beweglichen Elektronen in einem Kristall nennenswert. Durch die Delokalisierung dieser Elektronen im Metall wird auch hier die abstoßende Wechselwirkung der Atomrümpfe reduziert.

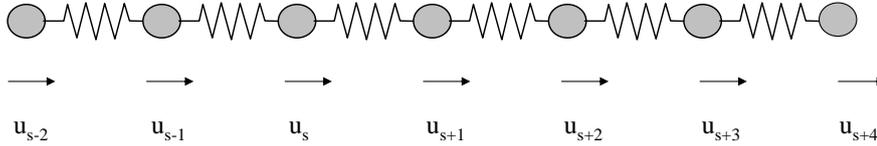
## 2.3 Gitterschwingungen

Die Dynamik eines Gitters bestimmt viele Eigenschaften wie spezifische Wärme und Transporteigenschaften. Durch die kollektive Wechselwirkung einer großen Anzahl von Atomen wird die quantenmechanische Natur eines Materials schon bei sehr hohen Temperaturen sichtbar. So ist die spezifische Wärme vieler Materialien niedriger als man es von der normalen Thermodynamik eines Ensembles von Oszillatoren erwarten würde. Dies löst sich auf, wenn man die Gitterschwingungen eines Kristalls genau analysiert.

### 2.3.1 Lineare Kette mit 1 Atom pro Einheitszelle

Im folgenden soll die Dynamik in einem Kristallgitter beschrieben werden. Betrachten wir zunächst eine lineare Kette von Atomen, deren Bindung untereinander als Federn angenähert wird (siehe Abb. 2.11). Die Kraftbilanz

für ein Teilchen der Masse  $M$  am Ort mit Index  $s$ , das um  $u_s$  aus seiner Gleichgewichtslage ausgelenkt wird ist:



**Abbildung 2.11:** Lineare Kette aus gleichen Atomen. Die Verschiebung eines Atoms mit Index  $s$  aus der Ruhelage wird mit  $u_s$  bezeichnet.

$$M \frac{d^2 u_s}{dt^2} = c(u_{s+1} - u_s) + c(u_{s-1} - u_s) \quad (2.44)$$

$c$  ist die Federkonstante der Bindung. Mit einem Fourier-Ansatz ( $u_s(x, t) \rightarrow u_s(x)e^{i\omega t}$ ) bekommt man:

$$-M\omega^2 u_s = c(u_{s+1} + u_{s-1} - 2u_s) \quad (2.45)$$

Diese Gleichung läßt sich mit dem Ansatz

$$u_s = u_0 e^{isk a} \quad (2.46)$$

lösen. Der Phasenfaktor  $e^{isk a}$  berücksichtigt, daß die Amplitude der Welle mit Wellenlänge  $\lambda$  ( $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ ) sich jeweils von Atom zu Atom entsprechend einem Abstand  $s$  mal  $a$  ändert. Damit bekommt man

$$M\omega^2 = -c(e^{ika} + e^{-ika} - 2) \quad (2.47)$$

bzw.

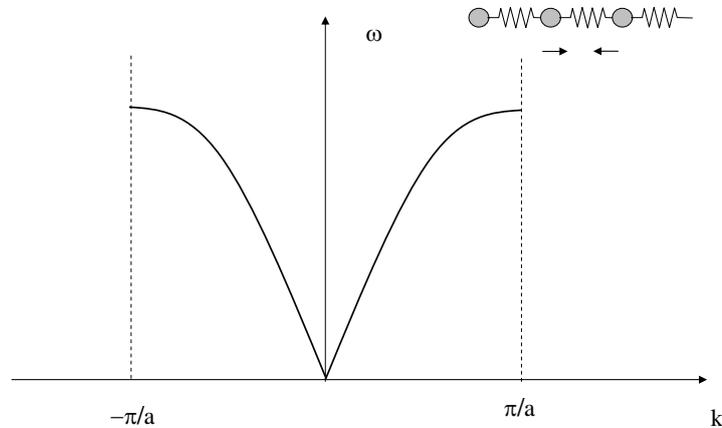
$$\boxed{\omega^2 = \frac{2c}{M}(1 - \cos ka)} \quad (2.48)$$

Die Beziehung zwischen Frequenz  $\omega$  (bzw. Energie  $\hbar\omega$ ) und Wellenzahl  $k$  (bzw. Impuls  $\hbar k$ ) bezeichnet man als **Dispersion**.  $\omega(k)$  ist in Abb. 2.12 gezeigt. Es lassen sich zwei Grenzfälle diskutieren:

- $k = \pm\pi/a$

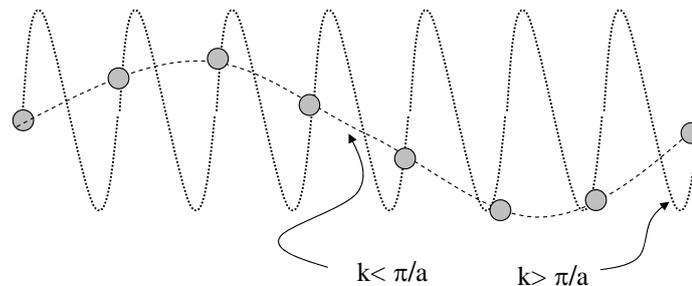
Für Werte von  $k = \pm\pi/a$  ergibt sich:

$$\left. \frac{\partial}{\partial k} \omega^2 = \frac{2ca}{M} \sin ka \right|_{k=\frac{\pi}{a}} = 0 \quad (2.49)$$



**Abbildung 2.12:** Phononen-Dispersion einer linearen Kette von Atomen. Die Einheitszelle enthält ein Atom.

Dies entspricht stehenden Wellen, da die Atome sich alle gegenphasig zueinander bewegen. Wellenvektoren mit Werten  $k > \frac{\pi}{a}$  beschreiben keine neuen Lösungen, da die Bewegungen der Atome sich immer durch Wellen mit  $k \leq \frac{\pi}{a}$  beschreiben lassen (siehe Abb. 2.13).



**Abbildung 2.13:** Wellenlängen mit  $k > \pi/a$  lassen sich immer auch mit Wellen mit  $k < \pi/a$  beschreiben.

- $ka \ll 1$

Dies entspricht dem langwelligen Grenzfall. Mit der Entwicklung des Cosinus zu  $\cos ka = 1 - \frac{1}{2}(ka)^2$  schreibt sich:

$$\omega^2 = \frac{c}{M} a^2 k^2 \quad (2.50)$$

bzw.

$$\omega = \sqrt{\frac{c}{M}}ak \quad (2.51)$$

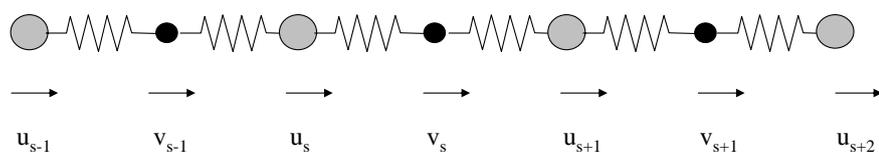
Dies entspricht der Dispersion **akustischer Wellen**:

$$\omega = v_s k \quad (2.52)$$

mit der Schallgeschwindigkeit  $v_s = \sqrt{\frac{c}{M}}a$

### 2.3.2 Kette mit 2 Atomen pro Einheitszelle

Wie ändert sich dieses Bild, wenn wir eine lineare Kette mit zwei unterschiedlichen Atomen der Massen  $M_1$  und  $M_2$  in der Einheitszelle betrachten? Die Verschiebungen der Atome aus der Gleichgewichtslage seien jeweils  $u_s$  und  $v_s$  (siehe Abb. 2.14). Die Kraftbilanz ergibt wieder:



**Abbildung 2.14:** Lineare Kette aus Einheitszellen mit zwei Atomen als Basis. Die Verschiebung eines Atoms ( $u$ ) mit Index  $s$  aus der Ruhelage wird mit  $u_s$  bezeichnet. Die Verschiebung eines Atoms ( $v$ ) mit Index  $s$  aus der Ruhelage wird mit  $v_s$  bezeichnet.

$$M_1 \frac{d^2 u_s}{dt^2} = c(v_s + v_{s-1} - 2u_s) \quad (2.53)$$

$$M_2 \frac{d^2 v_s}{dt^2} = c(u_{s+1} + u_s - 2v_s) \quad (2.54)$$

Diese gekoppelten Differentialgleichungen werden gelöst durch den Ansatz:

$$u_s = u e^{iska} e^{-i\omega t} \quad (2.55)$$

$$v_s = v e^{iska} e^{-i\omega t} \quad (2.56)$$

und man erhält

$$-\omega^2 M_1 u = cv(1 + e^{-ika}) - 2cu \quad (2.57)$$

$$-\omega^2 M_2 v = cu(e^{ika} + 1) - 2cv \quad (2.58)$$

$$(2.59)$$

mit der Lösung

$$\boxed{M_1 M_2 \omega^4 - 2c(M_1 + M_2)\omega^2 + 2c^2(1 - \cos ka) = 0} \quad (2.60)$$

Für den langwelligen Grenzfall lassen sich jetzt zwei Lösungen finden:

- **optischer Zweig**

Für  $ka \ll 1$  ergibt sich eine Lösung zu:

$$\omega^2 \simeq 2c \left( \frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right) \quad ka \ll 1 \quad (2.61)$$

Man erkennt, daß die Frequenz unabhängig von der Wellenlänge wird. Setzt man direkt  $k = 0$  ein in Gl. 2.57 ein und benutzt Gl. 2.61, so sieht man, daß:

$$\frac{u}{v} = -\frac{M_2}{M_1} \quad (2.62)$$

d.h. die Atome in einer Einheitszelle bewegen sich gegenphasig zueinander. Diese Art der Gitterschwingungen wird aus zwei Gründen als *optisch* bezeichnet: (i) Bei unterschiedlichen Atomen in der Einheitszelle kann sich ein elektrisches Dipolmoment ausbilden, daß zwingend ist für die Absorption elektromagnetischer Strahlung. (ii) Trägt man die Dispersion von Licht  $\omega = ck$  in die Dispersion ein, so erkennt man, daß ein Schnittpunkt nur mit dem optischen Phononenzweig entsteht.

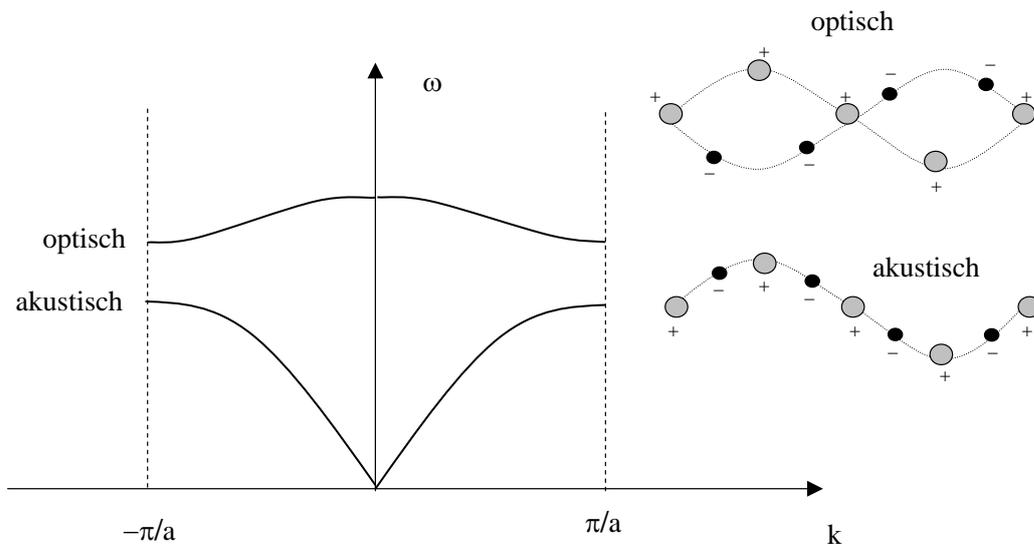
- **akustischer Zweig**

Für  $ka \ll 1$  ergibt sich die andere Lösung zu

$$\omega^2 \simeq \frac{1}{2} \frac{c}{M_1 + M_2} k^2 a^2 \quad (2.63)$$

Man erkennt wieder die lineare Abhängigkeit der Phononen-Frequenz von dem Wellenvektor, die charakteristisch für Schallwellen ist. Deshalb akustischer Zweig.

Neben den longitudinalen Schwingungen, wie sie in Abb. 2.11 und 2.14 skizziert sind, sind auch transversale Wellen sog. Scherwellen möglich, die mit einer anderen Federkonstante beschrieben werden. Aus diesem Grund hat man zwei longitudinale und zwei transversale Moden. Man kürzt diese als LA (longitudinal akustisch), LO (longitudinal optisch) bzw. TA (transversal akustisch), TO (transversal optisch) ab.



**Abbildung 2.15:** Phononen-Dispersion einer linearen Kette von Atomen bei denen eine Einheitszelle zwei Atome enthält.

### 2.3.3 Quantisierung der Gitterschwingungen, Phononen

Die Schwingungen des Kristallgitters lassen sich formal als harmonischer Oszillator mit der Energie:

$$E = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right) \quad (2.64)$$

beschreiben. Betrachtet man, zum Beispiel, die Streuung eines Röntgenphotons oder eines Neutrons an einem Kristallgitter, so kann diese auch inelastisch erfolgen unter Anregung eines Quantum einer Gitterschwingung, dem **Phonon**. Der dazugehörige Impuls dieser Gitterschwingung ist dann:

$$\vec{p}_{\text{Phonon}} = \hbar \vec{K} \quad (2.65)$$

Diese inelastische Beugung eines einfallenden Röntgenquants ( $\vec{k}$ ) an Gitterebenen, charakterisiert durch den reziproken Gittervektor  $\vec{G}$ , läßt sich formal schreiben als:

$$\vec{k}' + \vec{K} = \vec{k} + \vec{G} \quad (2.66)$$

für die Anregung eines Phonons und

$$\vec{k}' = \vec{k} + \vec{G} + \vec{K} \quad (2.67)$$

für die Vernichtung eines Phonons, mit  $\vec{k}'$  dem Wellenvektor für das gebeugte Röntgenquant. Dies ist eine formale Beschreibung. Man bezeichnet  $\vec{K}$  als sog. **Kristallimpuls**. Der physikalische Impuls einer einzelnen Gitterschwingung ist allerdings Null, wie im folgenden gezeigt wird. Der Impuls aller sich bewegenden Atome ist:

$$p = M \frac{d}{dt} \sum_s u_s \quad (2.68)$$

mit der Amplitude eines Atoms von  $u_s = u_0 e^{iska}$  ergibt sich unter Verwendung der geometrischen Reihe:

$$p = M \frac{d}{dt} \sum_s u_0 e^{iska} = M \frac{du_0}{dt} \frac{1 - e^{iNka}}{1 - e^{ika}} \quad (2.69)$$

Da  $k$  wegen der Randbedingungen nur diskrete Werte annehmen kann

$$k = \frac{2\pi}{L} r = \frac{2\pi}{Na} r \quad r = 1, 2, 3... \quad (2.70)$$

und die Länge  $L$  des Kristalls ausgedrückt werden kann als  $L = Na$ , ergibt sich  $e^{iNka} = 1$ . Demnach ist der physikalische Impuls einer Gitterschwingung gleich Null, wie man es auch für ein stehende Wellen erwartet.

Im mikroskopischen Bild wird z.B. bei der inelastischen Streuung eines Neutrons an einem bestimmtem Gitteratom zunächst physikalischer Impuls übertragen und eine laufende Welle entsteht. Durch Reflektionen dieser Welle an den Oberflächen des Kristalls verteilt sich die Anregung jedoch über das Gitter, bis eine stehende Welle verbleibt. Der übertragene Impuls steckt am Ende in einer Translationsbewegung des *ganzen Kristalls*.

Die Begriffe *Gitterschwingung* und *Phononen* werden oft als Synonyme verwendet, allerdings ist die Bedeutung unterschiedlich. Eine Gitterschwingung hat eine bestimmte Wellenlänge und Frequenz. Die Energie, die in dieser

Schwingung gespeichert ist, ist quantisiert wobei diese Energieeinheiten als *Phononen* bezeichnet werden. Dies ist ganz analog zur Hohlraumstrahlung bei der Licht einer bestimmten Wellenlänge einer stehenden Welle in diesem Hohlraum zugeordnet wird. Die Energie dieser em-Welle wird durch eine Besetzung mit Photonen ausgedrückt. Der Teilchencharakter von Photonen wird beim Comptoneffekt sichtbar, bei den Phononen entspricht dies dem Experiment der inelastischen Neutronenstreuung.

### 2.3.4 Wärmekapazität von Festkörpern

Die Tatsache, daß die Schwingungen eines Gitters quantisiert sind, wird bei der Betrachtung der spezifischen Wärme sichtbar. Betrachten wir zunächst den Energieinhalt eines Festkörpers, der sich aus der thermischen Bewegung seiner Atome bestimmt. Bei hohen Temperaturen läßt sich dieser Energieinhalt der  $N$  Atome als  $N$  Oszillatoren mit drei Freiheitsgraden beschreiben. Jeder Freiheitsgrad eines harmonischen Oszillators ist mit einer Energie  $k_B T$  verknüpft<sup>1</sup>. Damit wird der Energieinhalt

$$U = 3Nk_B T \quad (2.71)$$

bzw. die spezifische Wärme von einem Mol Atomen  $N = N_A$ :

$$C_V = 3N_A k_B = 3R \quad (2.72)$$

mit  $R$  der Gaskonstante. Diese Betrachtung versagt allerdings bei vielen Festkörpern, insbesondere bei tiefen Temperaturen. Hier muß berücksichtigt werden, daß die Gitterschwingungen quantisiert sind und die mittlere Anzahl  $\langle n_i \rangle$  an Phononen einer Frequenz  $\omega_i$  der Bose-Einstein Statistik gehorcht. Man bekommt:

$$\langle n_i \rangle = \frac{g_i}{e^{\frac{\hbar\omega_i}{k_B T}} - 1} \quad (2.73)$$

mit  $g_i$  der Entartung. Die Energie eines einzelnen Oszillators der Frequenz  $\omega_i$  ist gegeben als:

$$U_i = \hbar\omega_i \left( \langle n_i \rangle + \frac{1}{2} \right) \quad (2.74)$$

Im folgenden wollen wir den Anteil der Nullpunktsschwankungen gemäß dem Faktor  $1/2$  vernachlässigen und erhalten als Energie des gesamten Ensembles schließlich:

<sup>1</sup>Bei einem harmonischen Oszillator zählt man jeweils  $1/2k_B T$  für den Anteil an potentieller und an kinetischer Energie der Schwingung.

$$U = \sum_i U_i \quad (2.75)$$

bzw. eingesetzt:

$$U = \sum_i g_i \hbar \omega_i \frac{1}{e^{\frac{\hbar \omega_i}{k_B T}} - 1} = \int g(\omega) \hbar \omega \frac{1}{e^{\frac{\hbar \omega}{k_B T}} - 1} d\omega \quad (2.76)$$

mit  $x = \frac{\hbar \omega}{k_B T}$  wird die spezifische Wärme schließlich:

$$C_V = \frac{\partial U}{\partial T} = k_B \int g(\omega) \frac{x^2 e^x}{(e^x - 1)^2} dx \quad (2.77)$$

Für die Beschreibung der Entartung beziehungsweise Zustandsdichte beginnt man zunächst mit dem Phasenraum. Die mögliche Zahl  $N$  der Moden in einem Oktanten ist:

$$N = \frac{1}{8} \frac{4\pi}{3} k^3 \frac{1}{\left(\frac{\pi}{L}\right)^3} \quad (2.78)$$

Die Zustandsdichte leitet sich daraus ab zu:

$$g(\omega) = \frac{dN}{d\omega} = V k^2 \frac{1}{2\pi^2} \frac{dk}{d\omega} = V k^2 \frac{1}{2\pi^2} \frac{1}{\frac{d\omega}{dk}} \quad (2.79)$$

d.h. für die Bestimmung von  $g(\omega)$  benötigen wir eine Beziehung zwischen  $\omega$  und  $k$  um die Ableitung  $\frac{d\omega}{dk}$  bilden zu können. Hierfür werden drei Fälle diskutiert:

### Debye-Modell

Nachdem Debye-Modell verwendet man die Dispersion von akustischen Phononen:

$$\omega = v_s k \quad (2.80)$$

mit  $v_s$  der Schallgeschwindigkeit. Damit wird die Zustandsdichte:

$$g(\omega) = V \omega^2 \frac{1}{2\pi^2 v_s^3} \propto \omega^2 \quad (2.81)$$

Setzt man die Dispersion in Gl. 2.78 ein, so läßt sich eine charakteristische maximale Frequenz definieren:

$$\omega_D^3 = 6\pi^2 v_s^3 \frac{N}{V} \quad (2.82)$$

bzw. ein maximaler Wellenvektor  $k_D$

$$k_D = \frac{\omega_D}{v_s} = \left(6\pi^2 \frac{N}{V}\right)^{1/3} \quad (2.83)$$

Diese maximale Frequenz tritt auf, wenn sich die Atome jeweils gegenphasig zueinander bewegen. Kürzere Wellenlängen sind nicht möglich. Dies ist im Unterschied zu sehen zur Ableitung der Planck'schen Hohlraumstrahlung, bei der keine maximale Frequenz betrachtet werden musste, sondern zur Ermittlung des Energieinhaltes eines Hohlraums Gl. 2.76 einfach über Frequenz von Null bis unendlich integriert werden durfte.

Mit dieser maximalen Frequenz  $\omega_D$  wird die Energie zu:

$$U = \int_0^{\omega_D} \frac{V\omega^2}{2\pi^2v_s^3} \hbar\omega \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} - 1} d\omega \quad (2.84)$$

Nachdem es drei mögliche Schwingungen (1 longitudinal + 2 transversal) gibt, muß noch mit 3 multipliziert werden und man bekommt:

$$U = 3 \frac{V\hbar}{2\pi^2v_s^3} \int_0^{\omega_D} \frac{\omega^3}{e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} - 1} d\omega \quad (2.85)$$

mit  $x_D = \frac{\hbar\omega_D}{k_B T} = \frac{\Theta_D}{T}$  und  $\Theta_D$  der sog. **Debye-Temperatur** ergibt sich:

$$U = 9Nk_B T \left(\frac{T}{\Theta_D}\right)^3 \int_0^{x_D} \frac{x^3}{e^x - 1} dx \quad (2.86)$$

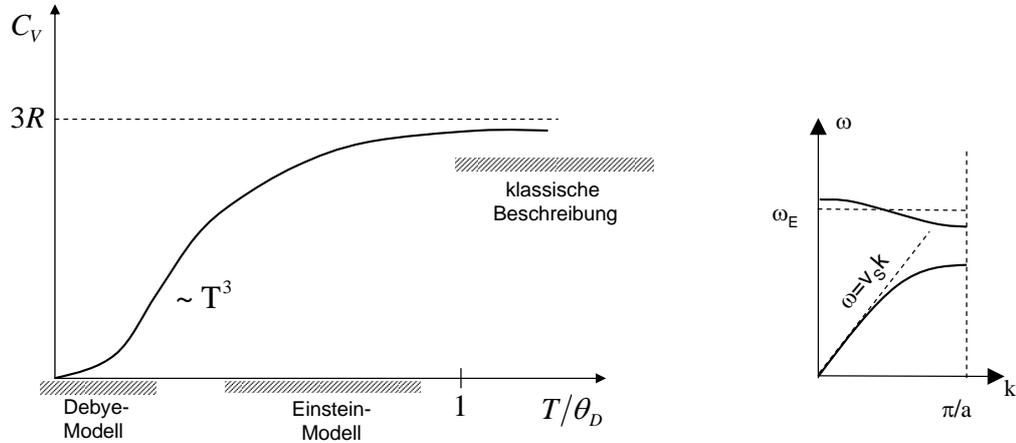
bzw. die spezifische Wärme zu:

$$C_V = 9Nk_B \left(\frac{T}{\Theta_D}\right)^3 \int_0^{x_D} \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2} dx \quad (2.87)$$

Bei tiefen Temperaturen folgt dieses Gesetz einer  $T^3$  Abhängigkeit, wie sie auch im Experiment beobachtet wird (siehe Abb. 2.16). Bezüglich der Debye-Temperaturen folgt die spezifische Wärme zahlreicher Festkörper einem universellen Verhalten. Die Debye-Temperaturen sind zum Beispiel für Fe (467 K), Cu (343 K) und Diamant (2230 K).

### Einstein-Modell

Das Einstein-Modell zur spezifischen Wärme betrachtet im wesentlichen die optischen Phononen. Hier genügt eine konstante Frequenz  $\omega_E$ , um die Dispersion zu beschreiben. Die Integration über die Zustände in Gl. 2.76 entfällt, da  $g$  nicht von  $\omega_E$  abhängt, und man setzt  $\sum_i g_i = N$ . Die Energie wird damit:



**Abbildung 2.16:** Spezifische Wärme eines Festkörpers. Nach dem Debye-Modell wird nur die Dispersion der akustischen Phononen mit  $\omega = v_s k$  angenähert. Nach dem Einsteinmodell wird die Dispersion der optischen Phononen mit  $\omega = \omega_E$  angenähert.

$$U = N \hbar \omega_E \frac{1}{e^{\frac{\hbar \omega_E}{k_B T}} - 1} \quad (2.88)$$

Damit wird die spezifische Wärme zu:

$$C_V = N k_B \left( \frac{\hbar \omega_E}{k_B T} \right)^2 \frac{e^{\frac{\hbar \omega_E}{k_B T}}}{\left( e^{\frac{\hbar \omega_E}{k_B T}} - 1 \right)^2} \quad (2.89)$$

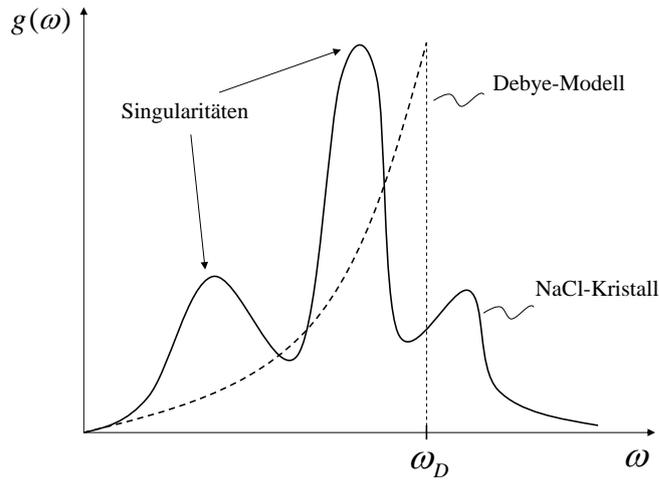
Der allgemeine Verlauf dieser spezifischen Wärme wird richtig wiedergegeben. Allerdings bei tiefen Temperaturen entsteht eine exponentielle Abhängigkeit der spezifischen Wärme von der Temperatur, die dem Experiment widerspricht.

### Allgemeiner Fall

Nach dem Debye-Modell ergibt sich eine einfache Abhängigkeit der Zustandsdichte von  $\omega^2$ . Allerdings ist die Dispersion realer Kristalle komplizierter als  $\omega = vk$ . Die allgemeine Formulierung der Zustandsdichte lautet:

$$g(\omega) = V k^2 \frac{1}{2\pi^2} \frac{1}{\frac{d\omega}{dk}} \quad (2.90)$$

die Singularitäten (sog. van-Hove Singularitäten) besitzt an den Frequenzen, für die  $\frac{d\omega}{dk} = 0$  gilt. Aus diesem Grund ist der Verlauf der Zustandsdichte realer Kristalle komplizierter als  $\sim \omega^2$ , wie in Abb. 2.17 illustriert ist.



**Abbildung 2.17:** Zustandsdichte eines realen Kristalls im Vergleich zum Debye-Modell.

### 2.3.5 Mößbauer-Spektroskopie

Die Tatsache, daß Gitterschwingungen quantisiert sind, wird gezielt von der sog. Mößbauer-Spektroskopie ausgenutzt. Dies ist eine Methode mit sehr hoher spektraler Auflösung, die es erlaubt, z.B. die Hyperfeinstruktur von Atomen zu untersuchen.

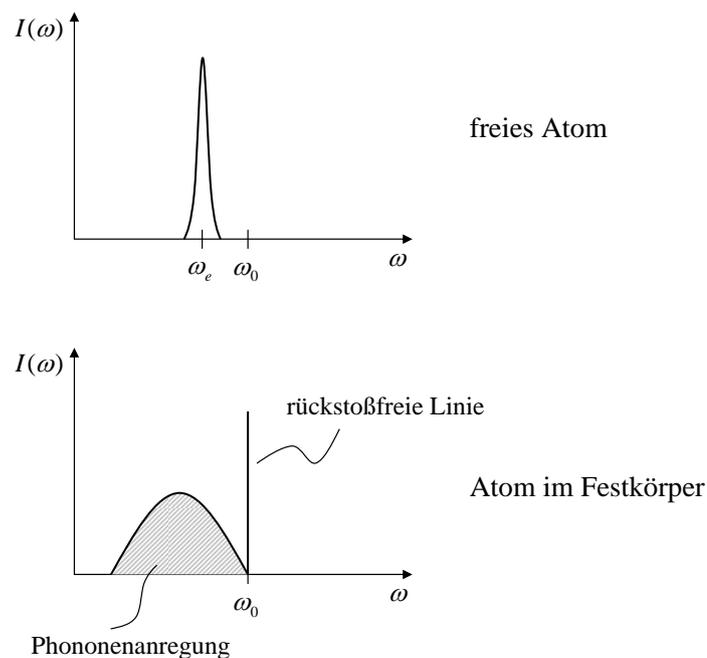
Betrachten wir zunächst die Emission eines Photons durch ein freies Atom entsprechend einem Übergang der Frequenz  $\omega_0$ . Durch die Aussendung des Photons erfährt das Atom der Masse  $M$  einen Rückstoß (Geschwindigkeit  $v$ ), und die Linie ist zu kleineren Frequenzen  $\omega_e$  ( $\omega_e < \omega_0$ ) verschoben wegen

$$\hbar\omega_e = \hbar\omega_0 - \frac{1}{2}Mv^2 \quad (2.91)$$

Dieses Photon kann von einem zweiten Atom nicht absorbiert werden, da für die Absorption die Frequenz  $\omega_a > \omega_0$  sein muß. Bei der Betrachtung der Absorption und Emission sichtbaren Licht in einem Ensemble von angeregten Atomen ist dieser Effekt vernachlässigbar, da der Rückstoß bei Photonen im sichtbaren Spektralbereich klein ist, und Doppler-Verschiebung durch die

thermische Bewegung die Frequenz-Verschiebung durch den Rückstoß ausgleichen kann. Bei der Emission von Photonen höherer Energie (keV) wird dieser Rückstoß allerdings nicht mehr vernachlässigbar.

Befindet sich das angeregte Atom in einem Kristall, so wird der Rückstoß auf das Kristallgitter übertragen. D.h. Phononen werden angeregt. Nachdem allerdings der Rückstoß in diesem Fall nur quantisierte Werte annehmen kann, sind auch Ereignisse möglich bei denen *kein* Phonon erzeugt wird, und der Kristall als ganzes den Impuls aufnimmt. Durch den großen Masse-Unterschied (angeregtes Atom/  $10^{22}$  Atome des Kristalls) ist die Frequenzverschiebung der Emissionslinien nahezu Null. Das Spektrum der emittierten Photonen besteht deshalb aus einer breiten Verteilung entsprechend der Anregung von Phononen und einer scharfen Linie entsprechend rückstoßfreier Ereignisse (siehe Abb. 2.18).

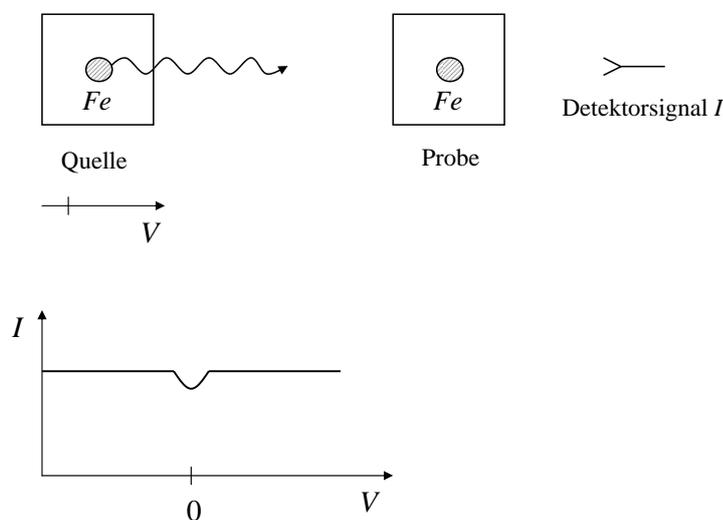


**Abbildung 2.18:** Bei der Emission eines Photons durch ein Atom ist die Frequenz durch den Rückstoß verschoben.

Diese scharfe Linienquelle auf der Basis einer rückstoßfreien Emission von Photonen wird durch die Verwendung radioaktiver Isotope als Photonenquelle realisiert. Dies soll am Beispiel des Zerfalls von  $^{57}\text{Co}$  nach  $^{57}\text{Fe}$  beschrieben werden.

Zunächst verwendet man einen Quell-Kristall, der das radioaktive Kobalt-Isotop enthält. Kobalt zerfällt zu einem Eisenkern durch die Umwandlung eines Protons in ein Neutron im Atomkern. Damit entsteht zunächst ein angeregter Eisenkern, der durch die Emission von Photonen ( $\gamma$ -Quant) in den Grundzustand relaxiert. In einem zweiten Proben-Kristall befindet sich dasselbe Eisenisotop, das nun das vom Quell-Kristall emittierte Photon wieder absorbieren kann. Hinter diesem Proben-Kristall befindet sich ein Detektor (siehe Abb. 2.19). Da die Emission sowie die Absorption des  $\gamma$ -Quants rückstoßfrei erfolgt, beobachtet man im Detektor nur ein geringes Signal. Bewegt man jetzt die Quelle kontinuierlich, wird das  $\gamma$ -Quant, das die Quelle verläßt, Doppler verschoben und es kann in dem Proben-Kristall nicht mehr absorbiert werden und das Signal im Detektor steigt an.

Ein typische Messung ist, zum Beispiel, eine Messung des lokalen Magnetfeldes in einem Kristall über die Hyperfeinstrukturaufspaltung. Hierzu wird ein Eisenatom als Sondenatom in den zu untersuchenden Proben-Kristall eingebaut. Durch das lokale Magnetfeld sind die Absorptions-Niveaus des Eisenatoms entsprechend der Hyperfeinstrukturaufspaltung aufgespalten. Beim Verfahren des Quell-Kristalls mit Geschwindigkeit  $v$  kann man dann im Absorptionsspektrum die Aufspaltung der Linien des Sondenatoms beobachten.



**Abbildung 2.19:** Mößbauer-Spektroskopie. Bei der Emission eines Photons durch ein Atom ist die Frequenz durch den Rückstoß verschoben.

Weiteres berühmtes Beispiel ist die Messung der Rotverschiebung eines Photons im Schwerfeld der Erde. Formal läßt sich einem Photon der Energie  $E$  entsprechend der Frequenz  $\nu$  eine Masse  $m$  zuschreiben gemäß:

$$E = mc^2 = h\nu \quad (2.92)$$

Durchläuft dieses Photon z.B. entgegen der Schwerkraft das Gravitationsfeld der Erde, so muß Arbeit verrichtet werden. Wegen der Energieerhaltung muß sich die Frequenz erniedrigen, d.h. eine Rotverschiebung tritt auf. Dieser an sich sehr kleine Effekt kann mittels Mößbauer-Spektroskopie nachgewiesen werden.

## 2.4 Das freie Elektronengas

### 2.4.1 Zustandsdichte, Fermienergie

Wie bei der Herleitung der Fermi-Dirac Verteilung diskutiert, ist die Gesamtzahl der möglichen Moden  $N$  in einem Kristallvolumen mit Kantenlänge  $L$  gegeben als:

$$N = 2 \frac{1}{8} \frac{4\pi}{3} k^3 \frac{1}{\left(\frac{\pi}{L}\right)^3} = V \frac{1}{3\pi^2} k^3 \quad (2.93)$$

Der Wellenvektor  $k$  ist mit der Energie für ein freies Teilchen verknüpft wie:

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (2.94)$$

Nach dem Pauli-Prinzip wird jede Mode mit einem Elektron besetzt. Dies erfolgt bis zu einem maximalen Wellenvektor  $k_F$  bzw. einer maximalen Energie (bei  $T=0$ )  $E_F$ , der Fermienergie. Für ein freies Elektronengas berechnet sich demnach  $E_F$  zu:

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{3\pi^2 N}{V} \right)^{2/3} \quad (2.95)$$

d.h. die Fermienergie skaliert mit der Dichte der Elektronen  $(N/V)^{2/3}$ . So hat zum Beispiel Cu eine Elektronendichte von  $8.34 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3}$  und eine Fermienergie von 7 eV und Ag eine Elektronendichte von  $5.85 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3}$  und eine Fermienergie von 5.48 eV.

Diese Fermienergie läßt sich auch als Fermi-Geschwindigkeit ausdrücken:

$$v_F = \frac{\hbar k_F}{m} = \frac{\hbar}{m} \left( \frac{3\pi^2 N}{V} \right)^{1/3} \quad (2.96)$$

Die Zahl der Zustände pro Energie-Intervall ist schließlich die Zustandsdichte  $g(E)$ :

$$g(E) = \frac{dN}{dE} = V \frac{1}{2\pi^2} \left( \frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} E^{1/2} \quad (2.97)$$

### 2.4.2 Spezifische Wärme der Elektronen

Betrachtet man die spezifische Wärme eines freien Elektronengases, so könnte man zunächst die Gesamtenergie von  $N$  Elektronen als:

$$U = \frac{3}{2} N k_B T \quad (2.98)$$

entsprechend freier Gasteilchen ansetzen. Damit wäre die spezifische Wärme:

$$C_V = \frac{dU}{dT} = \frac{3}{2} N k_B \quad (2.99)$$

Allerdings beobachtet man experimentell, daß die spezifische Wärme nur ca. 1% dieses Wertes beträgt. Diese Beobachtung läßt sich erklären, da von den Elektronen nur ein kleiner Teil thermisch angeregt werden kann, weil nach dem Pauli-Verbot eine Anregung immer in einem unbesetzten Zustand enden muß (siehe Abb. 2.20). D.h. nachdem die Anregungsenergie typischerweise  $k_B T$  beträgt, können nur Elektronen innerhalb eines Intervalls  $\Delta E = k_B T$  an der Fermi-Energie zur spezifischen Wärme beitragen:

$$C_V = \frac{d}{dT} \left( N k_B T \frac{T}{T_F} \right) = N k_B \frac{T}{T_F} \quad \text{mit} \quad E_F = k_B T_F \quad (2.100)$$

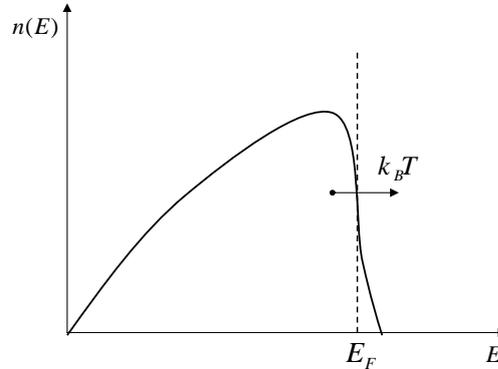
Dieses Ergebnis läßt sich auch quantitativer ableiten. Betrachten wir zunächst den Unterschied  $\Delta U$  in der Energie, wenn wir das freie Elektronengas von der Temperatur  $T_0 = 0$  auf die Temperatur  $T_1 = T$  aufheizen:

$$\Delta U = \int_0^\infty E g(E) f(E) dE - \int_0^{E_F} E g(E) dE \quad (2.101)$$

Hier ist  $f(E)$  die Besetzungs-Wahrscheinlichkeit:

$$f(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{k_B T}} + 1} \quad (2.102)$$

Bei der Integration über die Energie ergibt die Zustandsdichte in den Grenzen 0 und  $E_F$  genau die Teilchenzahl  $N$  bei  $T = 0$  (entsprechend  $f(E)=1$ )



**Abbildung 2.20:** Nur Elektronen in der Nähe der Fermi-Oberfläche (innerhalb  $k_B T$ ) können zur spezifischen Wärme beitragen.

bzw. in den Grenzen 0 und  $\infty$  bei beliebigen Temperaturen (entsprechend  $f(E)$ ):

$$N = \int_0^{E_F} g(E) dE = \int_0^{\infty} g(E) f(E) dE \quad (2.103)$$

bzw. multipliziert mit  $E_F$ .

$$N E_F = E_F \int_0^{E_F} g(E) dE = E_F \int_0^{\infty} g(E) f(E) dE \quad (2.104)$$

Diese Ausdrücke addieren und subtrahieren wir von Gl. 2.101 und bekommen nach dem Umsortieren der einzelnen Terme:

$$\Delta U = \int_0^{\infty} g(E) f(E) (E - E_F) dE + \int_0^{E_F} g(E) (E_F - E) dE \quad (2.105)$$

bzw.

$$\Delta U = \int_{E_F}^{\infty} (E - E_F) g(E) f(E) dE + \int_0^{E_F} (E_F - E) (1 - f(E)) g(E) dE \quad (2.106)$$

Damit wird die spezifische Wärme zu:

$$C_V = \frac{\partial \Delta U}{\partial T} = \int_0^{\infty} (E - E_F) \frac{\partial f(E)}{\partial T} g(E) dE \quad (2.107)$$

bzw. nach dem Einsetzen der Ausdrücke für  $g(E)$  und  $f(E)$ :

$$C_V = \frac{\partial \Delta U}{\partial T} = \frac{d}{dT} \left[ V \left( \frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \frac{1}{2\pi^2} \int_0^\infty \frac{E^{3/2}}{e^{\frac{E-E_F}{k_B T}} + 1} \right] \quad (2.108)$$

mit  $E_F \gg k_B T$  läßt sich der Integrand entwickeln und man bekommt schließlich:

$$C_V = \frac{\pi^2}{2} N k_B^2 \frac{T}{E_F} = \frac{\pi^2}{2} N k_B \frac{T}{T_F} \quad (2.109)$$

Zusammenfassend enthält die spezifische Wärme eines Festkörpers bei tiefen Temperaturen ( $E_F \gg k_B T$ ) zwei Anteile, den elektronischen und den phononischen:

$$C_V = \underbrace{\gamma T}_{\text{elektronisch}} + \underbrace{AT^3}_{\text{phononisch}} \quad (2.110)$$

mit  $\gamma$  und  $A$  zwei Konstanten. Wegen der  $T^3$ -Abhängigkeit dominiert bei sehr tiefen Temperaturen der elektronische Anteil.

### 2.4.3 Transport von Strom und Wärme

Im folgenden wollen wir die elektrische und thermische Leitfähigkeit eines Metalls betrachten, die im wesentlichen von den Eigenschaften des freien Elektronengases bestimmt ist.

#### elektrische Leitfähigkeit

Betrachten wir die Impulsbilanz für ein Elektron der Masse  $m$ , das sich in einem Kristall mit einer Driftgeschwindigkeit  $v$  bewegt. An den Kristall sei ein elektrisches Feld  $E$  angelegt.

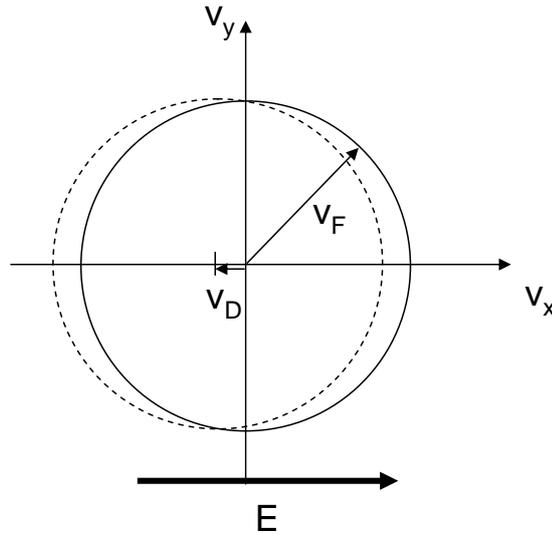
$$\frac{d}{dt} m v_D = eE - \frac{m v_D}{\tau} \quad (2.111)$$

Die Stoßzeit  $\tau$  berücksichtigt Stöße der Elektronen mit dem Kristallgitter, sprich Phononen. Diese Stoßzeit sei unabhängig von der Geschwindigkeit und ergibt sich näherungsweise aus der freien Weglänge  $\lambda$  wie:

$$\tau = \frac{\lambda}{v_F} \quad (2.112)$$

Hier ist  $v \sim v_F$ , da nur Elektronen nahe der Fermifläche an den Stößen teilnehmen können. An dieser Stelle muß zwischen der Driftgeschwindigkeit

$v_D$ , die die mittlere Bewegung aller Elektronen bezeichnet, und der Fermigeschwindigkeit, der wahren Geschwindigkeit eines einzelnen Elektrons unterschieden werden. Dies ist in Abb. 2.21 verdeutlicht. Generell ist  $v_F \gg v_D$ . Im Gleichgewicht ist Gl. 2.111 Null und man bekommt die sog. **Driftgeschwindigkeit**  $v_D$  zu:



**Abbildung 2.21:** Ein elektrisches Feld in x-Richtung führt zu einer Verschiebung der Geschwindigkeitsvektoren im Geschwindigkeitsraum, der durch  $v_x$ ,  $v_y$ ,  $v_z$  aufgespannt wird. Diese kleine Verschiebung erfolgt um die Driftgeschwindigkeit  $v_D$ . Die maximale Geschwindigkeit eines einzelnen Elektrons bleibt von der Größenordnung  $v_F$ .

$$v_D = \frac{eE}{m} \tau \quad (2.113)$$

Die Stromdichte ist damit:

$$j = nev_D = n \underbrace{\frac{e^2}{m} \tau}_{\sigma} E \quad (2.114)$$

mit  $\sigma$  der Leitfähigkeit. Die freie Weglänge  $\lambda$  wird durch die Streuung an Phononen oder Defekten im Gitter bestimmt. Bei hohen Temperaturen skaliert die Anzahl der Phononen als Stoßpartner für die Elektronen-Streuung linear mit der Temperatur, d.h. die freie Weglänge skaliert mit  $1/T$  und damit auch die Leitfähigkeit  $\sigma$  (der spezifische Widerstand  $\rho$  nimmt linear mit  $T$  zu).

### Umklapp-Prozesse (Vertiefung)

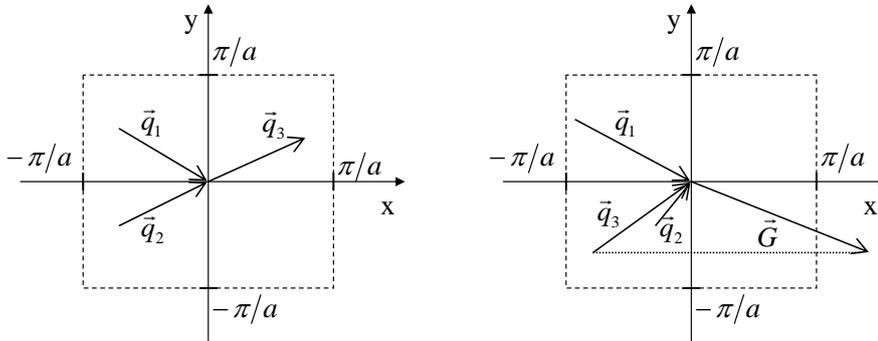
Eine Besonderheit des Stromtransportes in Festkörpern sind sog. **Umklapp-Prozesse**. Betrachten wir zunächst Streuprozesse zwischen Phononen. Nachdem Phononen keine realen Teilchen sind, sind Stöße erlaubt bei denen sich zwei Phononen (Wellenvektor  $\vec{q}_1, \vec{q}_2$ ) zu einem neuen Phonon ( $\vec{q}_3$ ) zusammenfügen, entsprechend:

$$\vec{q}_1 + \vec{q}_2 = \vec{q}_3 \quad (2.115)$$

Falls der Vektor  $\vec{q}_3$  allerdings *außerhalb* der ersten Brillouin-Zone liegt, beschreibt er keine Lösung, die man nicht auch durch eine Lösung *innerhalb* der ersten Brillouin-Zone beschreiben könnte (siehe Abb. 2.13). Unter Verwendung eines reziproken Gittervektors  $\vec{G}$  läßt sich ein neuer Streuprozess formulieren

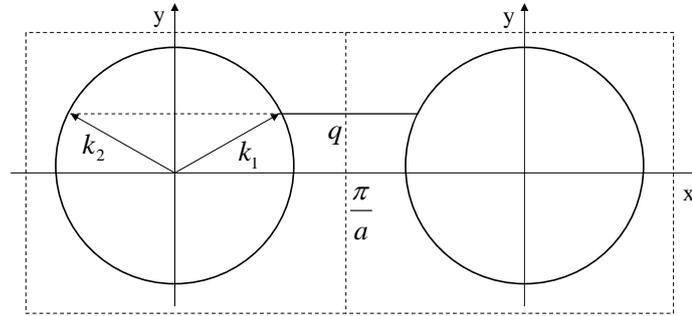
$$\vec{q}_1 + \vec{q}_2 = \vec{q}_3 + \vec{G} \quad (2.116)$$

wie in Abb. 2.22 verdeutlicht. Die die Richtung des Phononen-Impulses dreht sich um, ein Umklapp-Prozess.



**Abbildung 2.22:** Umklapp-Prozesse bei Streuprozessen von Phononen untereinander führen zu einer starken Richtungsänderung des Phononenimpulses.

Entsprechende Streuprozesse sind auch beim elektronischen Transport möglich. Bei einem Stoß eines Elektrons mit Wellenvektor  $\vec{k}_1$  mit einem Phonon und Wellenvektor  $\vec{q}$  kann die resultierende in der nächsten Brillouin-Zone liegen. Ein solcher Stoß ist gleich bedeutend mit einem Stoß mit einem Phonon mit Wellenvektor  $\vec{q} - \vec{G}$ . D.h. der Impuls der Elektronen dreht sich um auf  $\vec{k}_2$ , der Umklapp-Prozess (siehe Abb. 2.23)



**Abbildung 2.23:** Umklapp-Prozesse bei Streuprozessen von Elektronen mit Phononen führen zu einer starken Richtungsänderung.

### thermische Leitfähigkeit

Bei der thermischen Leitfähigkeit betrachtet man zunächst den Transport von Energie durch Teilchendiffusion, die durch einen Temperaturgradienten  $\frac{dT}{dx}$  getrieben wird. Der Wärmefluß  $j_{W\text{aerme}}$  in Energie pro Zeit und Fläche ist:

$$j_{W\text{aerme}} = -\kappa \frac{dT}{dx} \quad (2.117)$$

mit der thermischen Leitfähigkeit  $\kappa$ . Betrachten wir ein Volumen mit linearer Ausdehnung entsprechend der freien Weglänge  $\lambda$  (siehe Abb. 2.24). Der Fluß an Teilchen der Dichte  $n$ , der sich in eine x-Richtung bewegt, ist  $n\langle|v_x|\rangle$ , mit  $\langle|v_x|\rangle$  der mittleren Geschwindigkeit in x-Richtung. Der Temperatur-Unterschied auf beiden Seiten des Volumens sei  $\Delta T$  mit  $\Delta T = \frac{dT}{dx}\lambda$ . Jedes Teilchen transportiert eine Energie  $c_V\Delta T$  ( $c_V = \frac{C_V}{n}$ ). Damit wird der Wärmefluß:

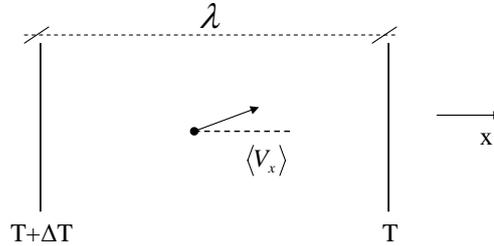
$$j_{W\text{aerme}} = -n\langle|v_x|\rangle c_V\Delta T = -n\langle|v_x|\rangle c_V\lambda \frac{dT}{dx} \quad (2.118)$$

Damit wird die Wärmeleitfähigkeit zu:

$$\kappa = \frac{1}{3}\langle v \rangle C_V \lambda \quad (2.119)$$

mit der spezifischen Wärme  $c_v$  und der Fermi-Geschwindigkeit  $v_F$  ergibt sich<sup>2</sup>:

<sup>2</sup>Für die Geschwindigkeit in der sich die Wärme ausbreitet haben wir hier direkt  $v_F$



**Abbildung 2.24:** Der Wärmetransport wird getrieben durch einen Temperaturgradienten. Die freie Weglänge sei  $\lambda$  und die mittlere Geschwindigkeit in x-Richtung  $\langle v_x \rangle$ .

$$\kappa = \frac{\pi^2}{3} N k_B^2 T \frac{1}{m v_F^2} v_F \lambda \quad (2.120)$$

### Vergleich elektrische / thermische Leitfähigkeit

Bildet man den Quotienten aus der thermischen und der elektrischen Leitfähigkeit stellt man fest, dass die Größen  $m$ ,  $v_F$  und  $\lambda$  sich heraus kürzen und man bekommt:

$$\frac{\kappa}{\sigma} = \frac{\pi^2}{3} \left( \frac{k_B}{e} \right)^2 T \quad (2.121)$$

Dies bezeichnet man als **Wiedemann-Franz-Gesetz**. Es besagt, daß das Verhältnis  $\kappa/\sigma$  nur noch linear von der Temperatur abhängt und die Einzelheiten des Streuprozesses, wie er sich in  $\lambda$  verbirgt, fallen heraus. Dies ist einsichtig, da elektrische wie thermische Leitfähigkeit durch den Transport von Elektronen bedingt sind, die die gleichen Stoßprozesse mit den Phononen in dem Gitter erfahren. Dies Ergebnis war historisch bedeutend als Bestätigung für die Hypothese des freien Elektronengases.

---

eingesetzt, während es bei der Betrachtung der Leitfähigkeit die Driftgeschwindigkeit  $v_D$  war. Bei der elektrischen Leitfähigkeit betrachten wir direkt den Transport von Elektronen, während die thermische Leitfähigkeit den Transport von Energie ohne grundsätzlichen Massentransport (Diffusion vs. Konvektion) betrachtet.

## 2.5 Elektronen in periodischen Potentialen

Im folgenden soll der Fall betrachtet werden, daß sich die Elektronen in einem Festkörper nicht grundsätzlich frei bewegen können, sondern daß ihre kinetische und potentielle Energie entsprechend dem Ort im elektrostatischen Potential der Atomrümpfe variiert.

### 2.5.1 Ursprung der Bandlücke

Zunächst wollen wir anschaulich die prinzipielle Form der Energie-Impuls-Beziehung (Dispersion) von Elektronen, die sich in einem periodischen Potential bewegen, verstehen. Zur Behandlung beginnen wir mit der Schrödingergleichung:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + E_{pot} \right] \Psi = E \Psi \quad (2.122)$$

wobei wir als Ansatz ebene Wellen verwenden. Eine Komponente zu dem Wellenvektor  $k$  sei:

$$\boxed{\Psi_k(\vec{r}) = u(\vec{r}) e^{i k r}} \quad (2.123)$$

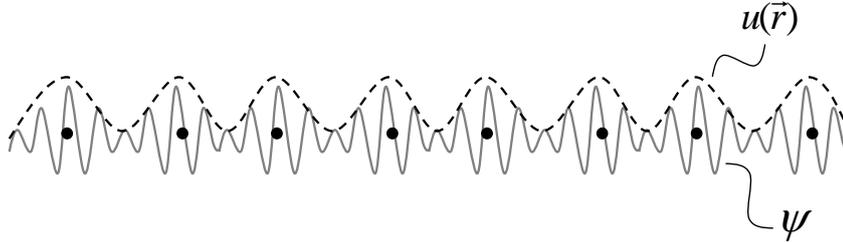
Durch Überlagerung von ebenen Wellen ( $\sum_k c_k e^{i k r}$ ) lassen sich beliebige Lösungen wie Wellenpakete etc. konstruieren. Die Amplitude dieser Welle soll zusätzlich durch die Periodizität des Gitters moduliert werden. Dies geschieht durch eine Einhüllende  $u(\vec{r})$ , für die gilt:

$$u(\vec{r}) = u(\vec{r} + \vec{T}) \quad (2.124)$$

mit  $\vec{T}$  einem Translationsvektor des Gitters. Eine typische Wellenfunktion ist in Abb. 2.25 gezeigt. Man bezeichnet die Art von Lösungen als **Bloch-Funktionen**. Ein einfacher Ansatz besteht aus einer Welle zusammengesetzt aus zwei Komponenten mit Wellenvektoren  $k$  und  $-k$  und den jeweiligen Amplituden  $A$  und  $B$  als einfachste Form der Einhüllenden. Man erhält:

$$\Psi = A e^{i k x} + B e^{-i k x} \quad (2.125)$$

Betrachten wir die Lösung für  $k = \pm \frac{\pi}{a}$ , für die die Beugungsbedingung erfüllt ist. D.h. die Elektronenwellen werden an den Gitterebenen gebeugt und eine vorwärts laufende Welle wird in eine rückwärts laufende Welle umgewandelt und umgekehrt, es entstehen stehende Wellen. Damit der Ansatz 2.125 eine stehende Welle beschreibt, muß gelten  $|A| = |B|$ . Damit gibt es zwei Möglichkeiten für  $\Psi$ :



**Abbildung 2.25:** Bloch-Funktionen als Ansatz für die Wellenfunktion eines Elektrons in einem periodischen Potential.

$$\Psi_{\pm} = \frac{A}{\sqrt{2}} (e^{i\frac{\pi}{a}x} \pm e^{-i\frac{\pi}{a}x}) \quad (2.126)$$

mit der Aufenthaltswahrscheinlichkeit für die Elektronen:

$$|\Psi_{+}|^2 = 2A^2 \cos^2 \frac{\pi x}{a} \quad (2.127)$$

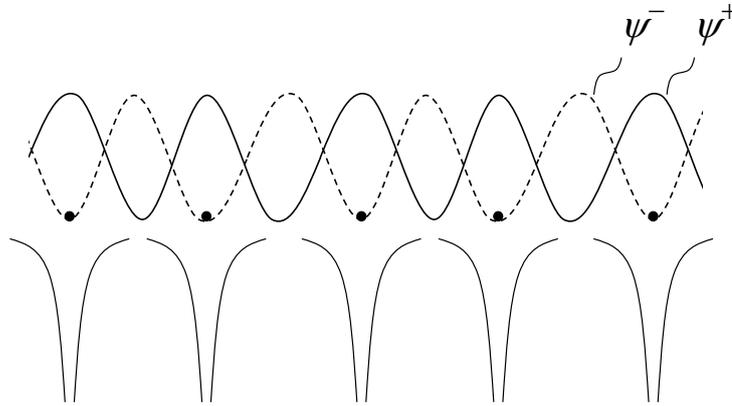
$$|\Psi_{-}|^2 = 2A^2 \sin^2 \frac{\pi x}{a} \quad (2.128)$$

Diese beiden Lösungen lassen sich grafisch veranschaulichen (siehe Abb. 2.26):(i) Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit der Elektronen ist bei der Lösung  $\Psi_{+}$  *am Ort* der Atomrümpfe lokalisiert. Die Elektronen erfahren deshalb eine größere Bindungsenergie und dieser Zustand ist energetisch günstig. (ii) Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit der Elektronen ist bei der Lösung  $\Psi_{-}$  *zwischen* der Atomrümpfe lokalisiert. Die Elektronen haben eine höhere potentielle Energie und der Zustand ist energetisch ungünstiger. D.h. für  $k = \frac{\pi}{a}$  entstehen zwei Zustände, die energetisch voneinander durch die sog. **Energielücke** getrennt sind.

Trägt man die Energie-Impuls Beziehung der Elektronenwellen auf, so ergibt sich als generelle Abhängigkeit zunächst die parabolische Form entsprechend:

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (2.129)$$

d.h. Elektronen-Wellen mit Wellenvektoren, die nicht der Beugungsbedingung entsprechen, bewegen sich ähnlich freier Elektronen durch den Kristall. Für Wellenvektoren im Bereich  $k = \frac{\pi}{a}$  bzw. Vielfachen davon können



**Abbildung 2.26:** Bei Wellenvektoren von  $k = \frac{\pi}{a}$  gibt es zwei Möglichkeiten der Realisation von stehenden Wellen im Ortsraum. Hierbei besitzt die Wellenfunktion  $\Psi_+$  einen niedrigeren Energieeigenwert als die Wellenfunktion  $\Psi_-$ .

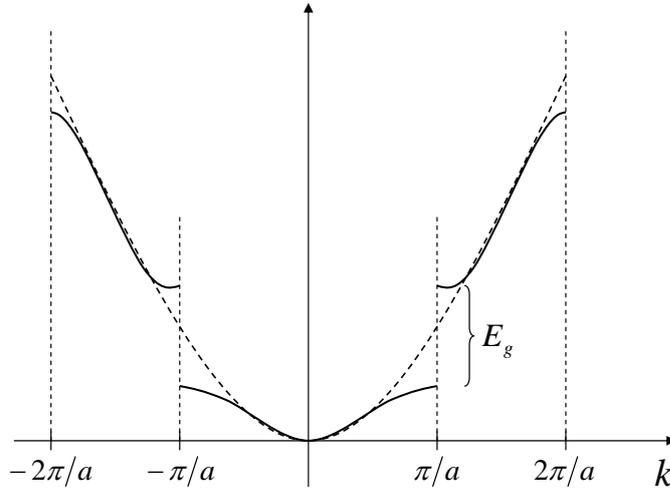
die Elektronenwellen die Beugungsbedingung erfüllen und eine Aufspaltung findet statt, entsprechend der Energielücke. Die prinzipielle Form dieser Dispersion ist in Abb. 2.27 gezeigt.

Man erkennt, daß nur bestimmte Energien zulässig sind, für die es eine Lösung der Schrödinger-Gleichung gibt. Diese Bereiche sind jeweils durch Energielücken getrennt. Die Bereiche an erlaubten Zuständen bezeichnet man als **Energiebänder**. Dies ist im Unterschied zu den scharfen Energieniveaus eines Elektrons in einem Atom: bringt man Atome immer näher zueinander, so findet ein Überlapp statt und die Wellenfunktion des einzelnen Elektrons ist nicht mehr am Ort des Atoms festgelegt, sondern kann sich auf den Kristall ausbreiten. Dementsprechend verbreitert sich das scharfe Energieniveau für ein Elektron eines einzelnen Atoms zu einem Energieband für dieses Elektron in einem Kristall.

Energiebänder lassen sich auch in einer reduzierten Form darstellen, indem man die Zustände jeweils um einen reziproken Gittervektor  $\vec{G}$  in den Bereich zwischen  $-\frac{\pi}{a} < k < \frac{\pi}{a}$ , der ersten Brillouin-Zone, verschiebt. Dies ist Abb. 2.28 gezeigt. Nachdem die reziproken Gittervektoren die Symmetrie des Gitters wiedergeben, kann man zeigen, daß die Energieeigenwerte

$$E(\vec{k}) = E(\vec{k} + \vec{G}) \quad (2.130)$$

jeweils identisch sind.



**Abbildung 2.27:** Die Dispersion freier Elektronen zeigt für Wellenvektoren  $k = \frac{\pi}{a}n$  mit  $n = 1, 2, 3, \dots$  charakteristische Energielücken.

## 2.5.2 Bandstruktur-Rechnungen

Die Form der Energiebänder soll jetzt genauer diskutiert werden. Das Bindungspotential  $V(x)$  der Atomrümpfe lässt sich wieder als Fourier-Reihe mit der Periodizität des Kristallgitters darstellen:

$$V(x) = \sum_G V_G e^{iGx} \quad (2.131)$$

Dies ist analog zur Beschreibung des Gitters bei der Ableitung der Laue-Beugung. Die Fourieranalyse kodiert die genaue Form des Potentials im Festkörper. Die einfachste Annäherung entspricht z.B. nur zwei Termen in der Fourier-Reihe mit  $\vec{G} = \pm \frac{2\pi}{a}$ :

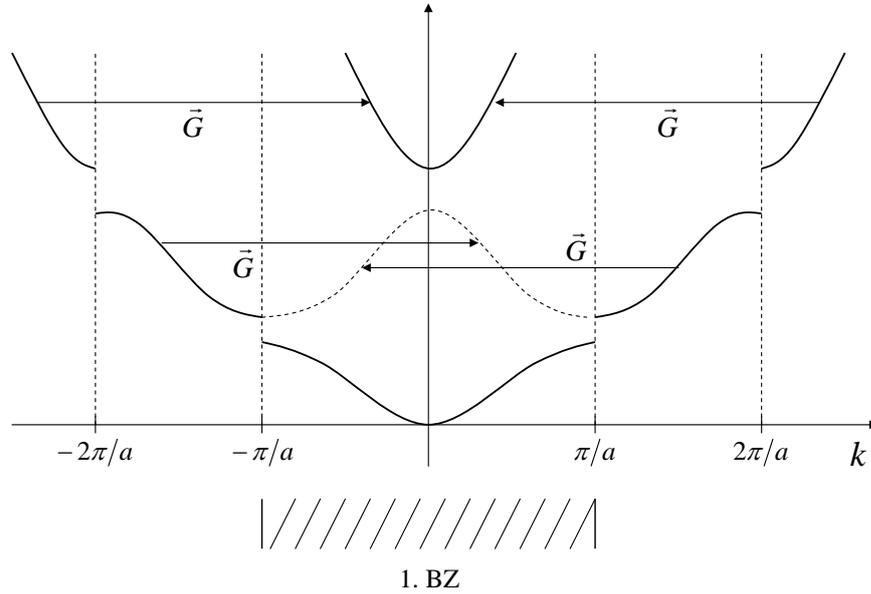
$$V(x) = V_G \cos\left(\frac{2\pi}{a}x\right) \quad (2.132)$$

Wieder gilt es, die Schrödinger-Gleichung zu lösen.

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(x) \right] \Psi = E \Psi \quad (2.133)$$

mit dem Ansatz ebener Wellen, bzw. Bloch-Funktionen der Form:

$$\Psi = \sum_k c_k e^{ikx} \quad (2.134)$$



**Abbildung 2.28:** Reduziertes Zonenschema zur Beschreibung der Energiebänder.

Setzt man Gl. 2.131 und Gl. 2.134 in Gl. 2.133 ein, so erhält man:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \sum_k k^2 c_k e^{ikx} + \sum_G \sum_k V_G e^{iGx} c_k e^{ikx} = E \sum_k c_k e^{ikx} \quad (2.135)$$

Diese Gleichung läßt sich nur lösen, wenn für die Koeffizienten zu den Termen von  $e^{ikx}$  der einzelnen Fourier-Komponenten gilt:

$$\underbrace{\frac{\hbar^2 k^2}{2m}}_{\lambda_k} c_k + \sum_G V_G c_{k-G} = E c_k \quad (2.136)$$

Man erkennt, daß ein Gleichungssystem entsteht, das jeweils eine Verknüpfung herstellt für die Koeffizienten  $c_k$  und  $c_{k-G}$ . Die sog. **Hauptgleichung** für Bandstruktur-Rechnungen ist damit:

$$\boxed{(\lambda_k - E)c_k + \sum_G V_G c_{k-G} = 0} \quad (2.137)$$

Der Ausdruck entspricht einem Gleichungssystem für die Koeffizienten  $c_k$ . Zur Beschreibung des Potentials genügen oftmals nur wenige Komponenten

von  $G$ . Im folgenden sollen deshalb einfache Spezialfälle näher betrachtet werden. Die Beschreibung des Potentials soll zunächst nur Komponenten zu  $G$  und  $-G$  enthalten. Aus Symmetriegründen gilt  $V_G = V_{-G}$ :

$$\sum_G V_G c_{k-G} = V_G c_{k-G} + V_G c_{k+G} \quad (2.138)$$

• **Lösung für  $k = \pm \frac{1}{2}G$**

Die Lösung der Hauptgleichung für Wellenvektoren an der Zonengrenze entsprechen einem Ansatz für die Wellenfunktion von:

$$\Psi = c_{\frac{1}{2}G} e^{i\frac{G}{2}x} + c_{-\frac{1}{2}G} e^{-i\frac{G}{2}x} \quad (2.139)$$

Setzen wir dies in die Gl. 2.137 ein, bekommen wir zwei Gleichungen für die Koeffizienten  $c_{\frac{1}{2}G}$  und  $c_{-\frac{1}{2}G}$ <sup>3</sup>.

$$(\lambda_k - E)c_{\frac{1}{2}G} + V_G c_{-\frac{1}{2}G} = 0 \quad (2.140)$$

$$(\lambda_k - E)c_{-\frac{1}{2}G} + V_G c_{+\frac{1}{2}G} = 0 \quad (2.141)$$

Hier betrachten wir nur die Koeffizienten  $c_{+\frac{1}{2}G}$  und  $c_{-\frac{1}{2}G}$ , die anderen werden vernachlässigt. Diese beiden Gleichungen haben nur dann eine nicht-triviale Lösung, wenn für die Determinante gilt:

$$\begin{vmatrix} \lambda_k - E & V_G \\ V_G & \lambda_k - E \end{vmatrix} = 0 \quad (2.142)$$

bzw.

$$(\lambda - E)^2 - V_G^2 = 0 \quad (2.143)$$

Damit bekommen wird eine Lösung der Form:

$$E = \lambda \pm V_g = \underbrace{\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{2}G\right)^2}_{\text{kinet. Energie}} \pm \underbrace{V_G}_{\text{Energiluecke}=2V_G} \quad (2.144)$$

<sup>3</sup>Hier nutzen wir die Randbedingungen aus, daß die Koeffizienten  $c_{\frac{3}{2}G}$  und  $c_{-\frac{3}{2}G}$  jeweils Null sein sollen.

Der erste Teil entspricht der kinetischen Energie des Elektrons für den Wellenvektor  $k = \frac{1}{2}G$ , der zweite Anteil ist die Energieaufspaltung ( $\pm V_G$ ) entsprechend der Bandlücke  $\Delta E = 2V_G$ .

• **Lösung für  $k \sim \frac{1}{2}G$**

Die Lösung für Wellenvektoren in der Nähe von  $k = \frac{1}{2}G$  wird wie folgt abgeleitet. Als Ansatz für die Wellenfunktion benutzen wir jetzt zwei Koeffizienten  $c_k$  und  $c_{k-G}$ :

$$\Psi(x) = c_k e^{ikx} + c_{k-G} e^{i(k-G)x} \quad (2.145)$$

Auch hier betrachten wir nur die beiden Koeffizienten  $c_k$  und  $c_{k-G}$ :

$$(\lambda_k - E)c_k + V_G c_{k-G} = 0 \quad (2.146)$$

$$(\lambda_{k-G} - E)c_{k-G} + V_G c_k = 0 \quad (2.147)$$

Die Bedingung einer verschwindenden Determinante führt zu der Gleichung:

$$E = \frac{1}{2}(\lambda_{k-G} + \lambda_k) \pm \left[ \frac{1}{4}(\lambda_{k-G} - \lambda_k)^2 + V_G^2 \right]^{1/2} \quad (2.148)$$

mit den folgenden Substitutionen

$$\tilde{k} = k - \frac{1}{2}G \quad (2.149)$$

$$\lambda = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{1}{2}G \right)^2 \quad (2.150)$$

$$E_{\pm} = \lambda \pm V_G \quad (2.151)$$

$\tilde{k}$  ist der Kristallimpuls mit Bezug zu dem Kristallimpuls, den ein Elektron direkt an der Zonengrenze bei  $\frac{1}{2}G$  besitzt.  $\lambda$  ist die kinetische Energie genau an der Zonengrenze, und  $E_{\pm}$  ist die Energie direkt unter- bzw. oberhalb der Bandlücke.

Mit diesen Substitutionen erhält man schließlich:

$$E_{\tilde{k}} = E_{\pm} + \frac{\hbar^2 \tilde{k}^2}{2} \underbrace{\frac{1}{m} \left( 1 \pm \frac{2\lambda}{V_G} \right)}_{1/m^*} \quad (2.152)$$

Hier wurde die Wurzel in Gl. 2.148 für  $\frac{\hbar^2}{2m} G \tilde{k} \ll V_G$  entwickelt. Der erste Term entspricht der Aufspaltung der Bandlücke, wie es schon für  $k = \frac{\pi}{a}$  abgeleitet wurde. Der zweite Term bezeichnet die kinetische Energie in der Umgebung von  $k = \frac{\pi}{a}$ , die ausgedrückt werden kann als:

$$E_{kin} = \frac{\hbar^2 \tilde{k}^2}{2m^*} \quad (2.153)$$

Dies entspricht der Dispersion eines freien Teilchens mit der Masse  $m^*$ . Diese Masse bezeichnet man als **effektive Masse**, die sich aus der Elektronenmasse  $m$  berechnet wie:

$$m^* = m \left( 1 \pm \frac{2\lambda}{V_G} \right)^{-1} \quad (2.154)$$

Die effektive Masse kann sowohl positiv als auch negativ sein, entsprechend der Krümmung der Bänder. Diese effektive Masse bestimmt die Trägheit eines Festkörper-Elektrons bezüglich der Beschleunigung in einem elektrischen Feld. Eine negative effektive Masse entspricht der Bewegung eines *fehlenden* Elektrons. Dies wird weiter unten genauer diskutiert.

Da die Energie in der Nähe der Bandlücke proportional zu  $\tilde{k}^2$  ist, spricht man von einer **parabolischen Bandnäherung**.

- **Lösung mit imaginärem  $k$**

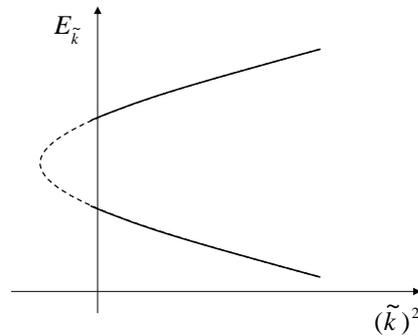
Die Hauptgleichung besitzt formal auch Lösungen für Energien innerhalb der Bandlücke. Hierzu betrachtet man den allgemeinen Fall der Lösung von 2.148 und erhält unter Verwendung der Abkürzungen  $\tilde{k}$ :

$$E_{\tilde{K}} = \lambda + \frac{\hbar^2 \tilde{k}^2}{2m} \pm \left[ 4\lambda \frac{\hbar^2 \tilde{k}^2}{2m} + V_G^2 \right]^{1/2} \quad (2.155)$$

Wie in Abb. 2.29 veranschaulicht, bekommt man bei der Auftragung der Energie gegen  $\tilde{k}$  im Bereich der Bandlücke negative Werte für  $\tilde{k}^2$ . D.h.  $\tilde{k}$  ist imaginär und damit auch  $\vec{k}$ . Setzt man dieses Ergebnis in

den Ansatz für die Wellenfunktion nach Gl. 2.134 ein, so erkennt man, daß die Lösungen exponentiell abfallend sind.

Solche Lösungen können nicht in einem unendlich ausgedehnten Kristall existieren, sondern nur an Oberflächen oder inneren Grenzflächen. Ein sog. Oberflächenzustand fällt ins Volumen des perfekten Kristalls ab. Die Abfalllänge  $\delta$  ist proportional zu  $1/\tilde{k}$  und hängt damit von der Lage des Energieniveaus in der Bandlücke ab. Wie in Abb. 2.29 ersichtlich, haben Zustände mit Energieeigenwerten in der Mitte der Bandlücke kleine Abfalllängen und sind demnach stark lokalisiert.



**Abbildung 2.29:** Lösungen der Hauptgleichung mit Energien innerhalb der Bandlücke sind exponentiell abfallend und können deshalb nur an Oberflächen, Grenzflächen oder lokalen Defekten existieren.

### 2.5.3 Konzept der effektiven Masse

Die Energie eines Elektrons läßt sich in der Nähe der Zonengrenze durch die Dispersion eines freien Teilchens beschreiben (siehe Gl. 2.152), wobei diesem Teilchen eine effektive Masse zugeschrieben wird (siehe Abb. 2.30). Bei konkav gekrümmten Bändern entspricht dies:

$$m_e^* = m \left[ 1 + \frac{2\lambda}{V_g} \right]^{-1} \quad (2.156)$$

und bei konvex gekrümmten Bändern:

$$m_h^* = m \left[ 1 - \frac{2\lambda}{V_g} \right]^{-1} \quad (2.157)$$

Dieser Ausdruck kennzeichnet die Trägheit des Elektrons gegenüber Beschleunigung z.B. in einem elektrischen Feld beim Stromtransport. Die Gruppengeschwindigkeit eines Wellenpakets ist:

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk} \quad (2.158)$$

Dies läßt sich zeitlich ableiten und man erhält mit

$$\frac{dv_g}{dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{d^2 E}{dk dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{d^2 E}{dk^2} \underbrace{\frac{dk}{dt}}_{\frac{1}{\hbar} F} \quad (2.159)$$

das Newton'sche Gesetz:

$$F = \frac{\hbar^2}{\underbrace{\frac{d^2 E}{dk^2}}_{m^*}} \frac{dv_g}{dt} \quad (2.160)$$

Man erkennt, daß die Krümmung der Bänder ein Maß für die Masse des Elektrons ist:

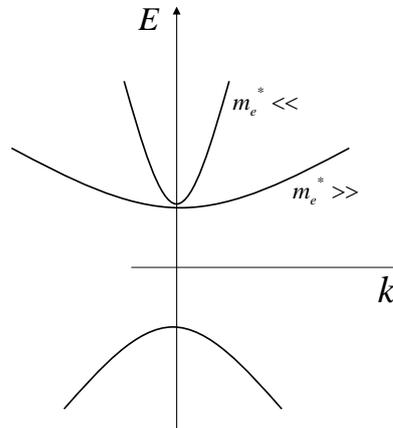
$$\boxed{\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{dk^2}} \quad (2.161)$$

Dies läßt sich anschaulich verstehen: (i) Falls die Elektronen in dem Festkörper stark an die Atome gebunden sind, so sind die Energieniveaus scharf definiert wie in freien Atomen. (ii) Bei fast freien Elektronen ist die Bindungsenergie an das einzelne Atom schwächer und es entsteht durch die Möglichkeit der Bildung ausgedehnter Elektronenwellen in dem Kristall ein Energieband. Das Energieniveau im Fall (i) läßt sich als Dispersion entsprechend einer minimalen Krümmung bzw. unendlicher effektiver Masse interpretieren. Ein Elektron, das stark an das jeweilige Atom gebunden ist, läßt sich nicht im Festkörper beschleunigen.

## 2.5.4 Metalle, Isolatoren

Die Bandstruktur wird jetzt gemäß dem Pauli-Verbot mit Elektronen besetzt. Nachdem nur bestimmte Wellenlängen in einem endlich ausgedehnten Kristall existieren können, ist die Zahl der möglichen Wellenvektoren:

$$k = \frac{\pi}{L}, 2\frac{\pi}{L}, 3\frac{\pi}{L}, \dots, N\frac{\pi}{L} = N\frac{\pi}{Na} = \frac{\pi}{a} \quad (2.162)$$



**Abbildung 2.30:** Die effektive Masse beschreibt die Trägheit der Elektronen gegen Beschleunigung in einem elektrischen Feld.

genau  $N$ . D.h. Pro Band innerhalb der ersten Brillouin-Zone existieren  $N$  unterscheidbare Zustände. Zusammen mit dem möglichen Spinzuständen ergibt dies  $2N$  Zustände pro Band. Die Anzahl der Valenzelektronen eines Elementes bestimmt jetzt, in wie weit die Bänder jeweils mit Elektronen gefüllt sind. Im Fall von Silizium mit 4 Valenzelektronen pro Atom ist das erste und das zweite Band komplett gefüllt. Bei einer ungeraden Zahl von Valenzelektronen ist das oberste Band jeweils nur halb gefüllt. Durch dieses Schema lassen sich jetzt Metalle und Isolatoren unterscheiden:

- **Metalle**

Bei Metallen ist das oberste Band nur halb gefüllt, d.h. durch das Anlegen eines elektrischen Feldes ist es den Elektronen möglich unbesetzte Zustände zu besetzen.

- **Isolatoren**

Bei Isolatoren ist das oberste Band jeweils vollständig gefüllt, d.h. die Elektronen können nicht zum Stromtransport beitragen, da keine unbesetzten Zustände zur Verfügung stehen.

Ausnahmen von dieser Regel bestehen bei Elementen, in denen die Bänder auf der Energieskala überlappen. So überlappen bei Beryllium mit 2 Valenzelektronen das erste und das zweite Band. Beim Auffüllen der Zustände werden die jeweils energetisch günstigsten Zustände gefüllt, so daß das erste und zweite Band jeweils nur teilweise gefüllt sind. Dies bedingt den metallischen Charakter von Beryllium.

## 2.6 Halbleiter

Halbleiter sind eine besondere Klasse von Isolatoren, die sich dadurch auszeichnen, daß ihre Leitfähigkeit durch Dotierung eingestellt werden kann. Dies ermöglicht den Einsatz dieser Materialien in elektronischen Bauelementen.

Nachdem bei einem Halbleiter wie beim Isolator das oberste Band jeweils vollständig gefüllt ist, spricht man von diesem Band als dem **Valenzband**, da es die Valenzelektronen beinhaltet. Das nächste unbesetzte Band bezeichnet man als **Leitungsband**. D.h. gelingt es dieses Band mit Elektronen zu besetzen, so können diese zur Leitfähigkeit beitragen.

### 2.6.1 Allgemeines

#### Direkter - Indirekter Halbleiter

Man unterscheidet prinzipiell direkte und indirekte Halbleiter. Bei **direkten** Halbleitern liegt das Maximum des Valenzbandes und das Minimum des Leitungsbandes bei dem selben Wellenvektor wie in Abb. 2.31 verdeutlicht. Bei einem **indirekten** Halbleiter liegen das Maximum des Valenzbandes und das Minimum des Leitungsbandes bei unterschiedlichen Wellenvektoren.

Dies hat Konsequenzen für die Form der Absorption  $\alpha$  von Photonen durch direkte und indirekte Halbleiter: bei der Absorption eines Photons wird ein Elektron von dem Valenzband in einem unbesetzten Zustand des Leitungsbandes angehoben. Photonen zeichnen sich dadurch aus, daß sie im Vergleich zur Energie einen sehr geringen Impuls besitzen ( $\hbar\omega = c\hbar k$  mit  $c$  der Lichtgeschwindigkeit). D.h. die Übergänge in der Bandstruktur erfolgen im wesentlichen parallel zur Energieachse. Bei einem indirekten Halbleiter ist eine direkte Anregung vom Valenzbandmaximum in das Leitungsbandminimum demnach nicht möglich. Eine solche Absorption findet nur statt falls gleichzeitig ein Phonon an dem Prozess beteiligt ist. Phononen zeigen ein umgekehrtes Verhalten zu den Photonen in der Bandstruktur. Während ihr Impuls sehr groß ist, ist ihre Energie relativ klein. D.h. in der Bandstruktur entspricht die Absorption eines Phonons im wesentlichen einem Übergang parallel zur Impulsachse ( $\vec{k}$ ). Nachdem bei einem Übergang in dem indirekten Halbleiter 3 Teilchen beteiligt sind (Elektron, Photon, Phonon) ist die Absorptionsrate entsprechend klein. D.h. die Absorption setzt zwar ein bei Photonenenergie oberhalb der Bandlücke, allerdings ist der Anstieg der Absorption relativ gering. Erst wenn direkte Übergänge zur Absorption beitragen, beobachtet man eine starke Absorption.

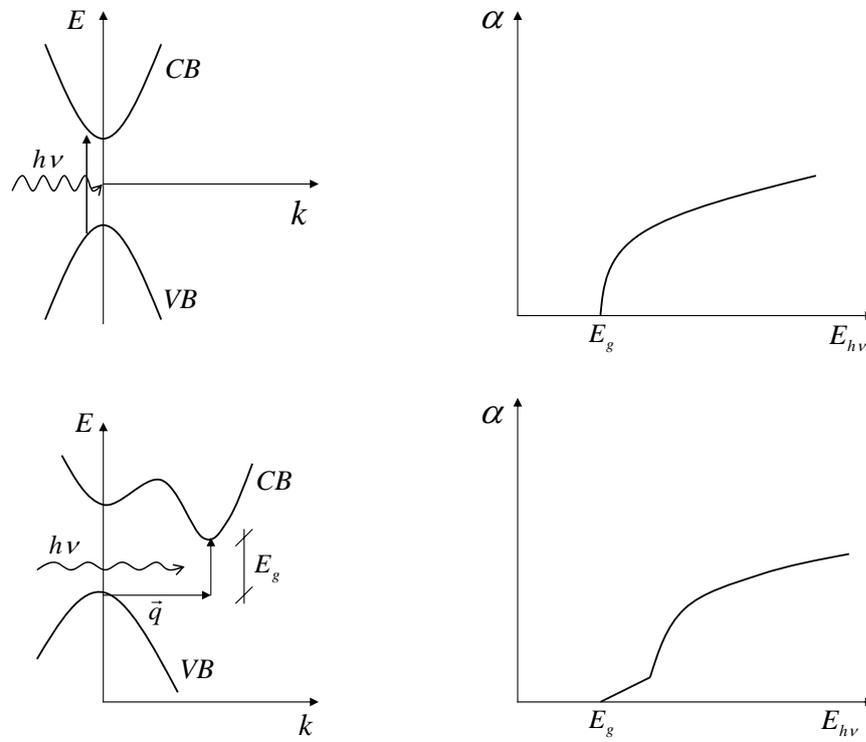


Abbildung 2.31: Direkter - indirekter Halbleiter.

## Elektronen und Löcher

Wird ein Elektron in einem Halbleiter vom Valenzband in das Leitungsband angeregt, so ist es frei beweglich und kann zum Stromtransport beitragen. In einem elektrischen Feld bewegt es sich entgegen der elektrischen Feldrichtung, wegen  $F = -eE$ . Zusätzlich entsteht allerdings auch ein unbesetzter Zustand im Valenzband, wie in Abb. 2.32 verdeutlicht. In einem äußeren elektrischen Feld kann dieser unbesetzte Zustand durch ein räumlich benachbartes Elektron aufgefüllt werden. Nachdem dieses Elektron seinerseits einen unbesetzten Zustand hinterlässt, beobachtet man die Bewegung eines fehlenden Elektrons bzw. Loches im Valenzband in Richtung des elektrischen Feldes. Dies entspricht einem Stromtransport durch positive Ladungsträger. Beide Arten des Ladungsträgertransportes bewirken einen Beitrag zum Strom in dieselbe Richtung.

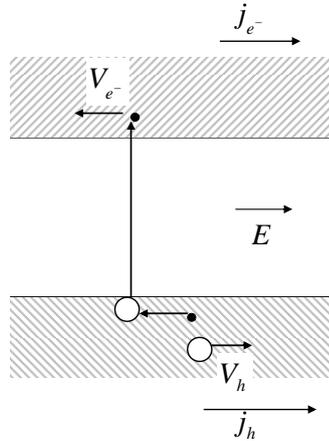


Abbildung 2.32: Stromtransport durch Elektronen bzw. Löcher.

## 2.6.2 Eigenleitung

Zur Beschreibung der Leitfähigkeit in einem Halbleiter betrachten wir zunächst die Anzahl an Elektronen bzw. Löcher, die bei gegebenem Fermi-Niveau bzw. Dotierung in einem Halbleiter bei Temperatur  $T$  vorliegen.

### Elektronendichte

Die Anzahl an Elektronen im Leitungsband wird zunächst durch deren Besetzungswahrscheinlichkeit bestimmt. Mit  $E - E_F \gg k_B T$  kann man die Fermi-Dirac-Verteilung annähern als:

$$f_e \sim e^{-\frac{E - E_F}{k_B T}} \quad (2.163)$$

Im Sinne der parabolischen Bandnäherung ist die Energie der Elektronen im Leitungsband:

$$E(k) = E_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (2.164)$$

mit  $E_c$  dem Minimum des Leitungsbandes. Damit wird die Zustandsdichte zu:

$$g_e(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left( \frac{2m_e}{\hbar^2} \right)^{3/2} (E - E_c)^{1/2} \quad (2.165)$$

Die Elektronendichte berechnet sich aus dem Integral über das Leitungsband zu:

$$n = \int_{E_c}^{\infty} g(E) f(E) dE = 2 \left( \frac{m_e k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2} e^{-\frac{E_c - E_F}{k_B T}} \quad (2.166)$$

### Löcherdichte

Bei der Beschreibung der fehlenden Elektronen im Valenzband beginnen wir zunächst mit der Besetzungswahrscheinlichkeit gemäß:

$$f_h = 1 - \frac{1}{e^{\frac{E - E_F}{k_B T}} + 1} = \frac{1}{e^{\frac{E_F - E}{k_B T}} + 1} \sim e^{-\frac{E - E_F}{k_B T}} \quad (2.167)$$

Auch hier wurde  $E - E_F \gg k_B T$  genähert. Die Zustandsdichte ergibt wieder in parabolischer Bandnäherung:

$$g_h(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left( \frac{2m_e}{\hbar^2} \right)^{3/2} (E_v - E)^{1/2} \quad (2.168)$$

mit  $E_v$  dem Maximum des Valenzbandes. Damit wird die Löcherdichte  $p$ :

$$p = 2 \left( \frac{m_h k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2} e^{-\frac{E_v - E_F}{k_B T}} \quad (2.169)$$

Wenn wir das Produkt aus Elektronen und Löcherdichte bestimmen erhalten wir:

$$np = 4 \left( \frac{k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^3 (m_e m_h)^{3/2} e^{-\frac{E_g}{k_B T}} \quad (2.170)$$

mit  $E_g = E_c - E_v$ . Man erkennt, daß das Produkt aus Elektronen- und Löcherdichte unabhängig von der Lage des Fermi-Niveaus ist. D.h. erhöht man durch Dotierung eines Halbleiters die Elektronendichte muß automatisch die Löcherdichte absinken.

### intrinsische Halbleiter

In einem **intrinsischen** Halbleiter, d.h. einem Halbleiter der nicht dotiert ist, muß die Zahl der zusätzlichen Elektronen im Leitungsband natürlich der Zahl der Löcher im Valenzband sein. Damit bekommen wir:

$$n_i = p_i = 2 \left( \frac{k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2} (m_e m_h)^{3/4} e^{-\frac{E_g}{2k_B T}} \quad (2.171)$$

Aus der Bedingung  $n = p$  bekommen wir mit Gl.2.166 und Gl. 2.169:

$$m_e^{3/2} e^{-\frac{E_c - E_F}{k_B T}} = m_h^{3/2} e^{\frac{E_v - E_F}{k_B T}} \quad (2.172)$$

bzw.

$$e^{2\frac{E_F}{k_B T}} = \left(\frac{m_h}{m_e}\right)^{3/2} e^{\frac{E_c + E_v}{k_B T}} \quad (2.173)$$

Damit ergibt sich als Fermienergie:

$$E_F = \frac{1}{2}(E_c + E_v) + \frac{3}{4}k_B T \ln \frac{m_h}{m_e} \quad (2.174)$$

D.h. in einem intrinsischen Halbleiter liegt das Fermi-Niveau in der Mitte zwischen Leitungsband und Valenzband. Bei der Beschreibung des freien Elektronengases wurde die Fermienergie benutzt, um den obersten besetzten Zustand bei  $T = 0$  zu charakterisieren. Bei der Beschreibung von Halbleitern ist die Fermienergie eine charakteristische Größe die Besetzung gemäß der Fermi-Dirac-Verteilung festlegt. D.h. die Fermi-Energie selbst muß kein möglicher Energieeigenwert der Bandstruktur-Rechnungen sein. So liegt die Fermi-Energie in dem intrinsischen Halbleiter in der Mitte der Bandlücke.

### Leitfähigkeit

Die Leitfähigkeit  $\sigma$  in einem Halbleiter ist wieder definiert durch:

$$j = \sigma E \quad (2.175)$$

mit  $j$  der Stromdichte und  $E$  dem elektrischen Feld. Wie in Gl. 2.114 ist die Leitfähigkeit gegeben als:

$$\sigma = \frac{ne^2}{m_e} \tau \quad (2.176)$$

mit  $\tau$  der Stoßzeit. Im Falle eines Halbleiters kann diese Leitfähigkeit sowohl durch Elektronenbewegung als auch durch Löcherbewegung getragen sein:

$$\sigma = \frac{ne^2}{m_e} \tau_e + \frac{pe^2}{m_h} \tau_h \quad (2.177)$$

Mit der intrinsischen Ladungsträgerdichte  $n = p$  ergibt sich:

$$\sigma = e^2 \left( \frac{\tau_e}{m_e} + \frac{\tau_h}{m_h} \right) 2 \left( \frac{k_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} (m_e m_h)^{3/4} e^{-\frac{E_g}{2k_B T}} \quad (2.178)$$

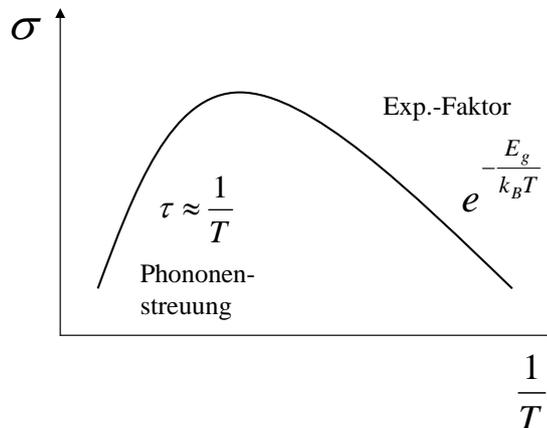


Abbildung 2.33: Leitfähigkeit.

d.h. die Leitfähigkeit eines Halbleiters ist durch zwei Beiträge bestimmt. Zum einen der Anregung der Ladungsträger in das Leitungsband gemäß  $e^{-E_g/k_B T}$  und Stößen mit den Phononen gemäß  $\tau$ . Trägt man die Leitfähigkeit über  $1/T$  auf, so erkennt man, daß bei tiefen Temperaturen zunächst die Leitfähigkeit ansteigt, da die Besetzung des Leitungsbandes zunimmt. Bei hohen Temperaturen wird die Zahl der Phononen so groß, daß die Stoßzeit abnimmt und die Leitfähigkeit entsprechend sinkt. Dies ist in Abb. 2.33 gezeigt.

### 2.6.3 Dotierte Halbleiter

Durch das Einbringen von Fremdatomen in einen Halbleiter kann dessen Leitfähigkeit gesteuert werden. Bringt man zum Beispiel ein Arsenatom in Silizium ein, so werden zunächst 4 Valenzelektronen in der Bindung zu den umgebenden Siliziumatomen verbraucht. Das fünfte Elektron ist nur schwach gebunden und eine **n-Dotierung** ist realisiert. Bringt man Bor in einem Silizium Kristall ein, so werden zunächst die drei Valenzelektronen von Bor für die Bindung zu den Siliziumatomen verbraucht. Für die vierte Bindung wird ein Elektron aus dem Valenzband des Kristalls gebunden und hinterlässt dort eine Fehlstelle, das Loch. Eine **p-Dotierung** ist realisiert worden. Dies ist in Abb. 2.34 veranschaulicht.

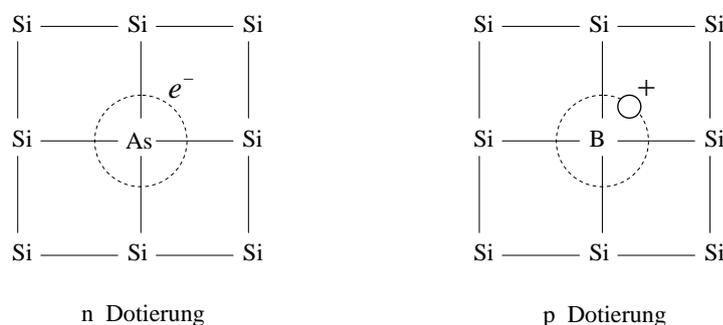


Abbildung 2.34: Dotierung.

### n Dotierung

Zur Beschreibung der n-Dotierung, betrachten wir zunächst das Arsenatom in einem Siliziumkristall. Wir setzen zunächst die Energie-Niveaus wie im Wasserstoffatom an. Dort hatten wir:

$$E_H = -R_H \frac{Z^2}{n^2} \quad \text{mit} \quad R_H = \frac{m_e e^4}{8\epsilon_0^2 \hbar^2} \quad (2.179)$$

Hier ist  $n$  die Hauptquantenzahl. Die Tatsache, daß wir ein Fremdatom in einem Kristall betrachten, können wir berücksichtigen, indem wir die Dielektrizitätskonstante  $\epsilon$  von Silizium und die effektive Masse  $m_e^*$  des Elektron einsetzen. Diese Ersetzungen sind:

$$\epsilon_0 \rightarrow \epsilon_0 \epsilon \quad (2.180)$$

$$m_e \rightarrow m_e^* \quad (2.181)$$

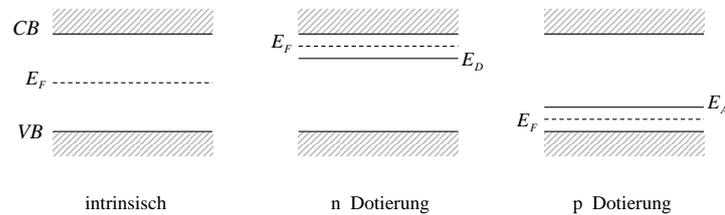
Damit bekommen wir für die Energieeigenwerte:

$$E_N(\epsilon, n) = -R_H \frac{m_e^*}{m_e} \frac{1}{\epsilon^2} \frac{Z^2}{n^2} \quad (2.182)$$

bzw. den Radius der Elektronenbahn:

$$r_n = \frac{4\pi\epsilon_0\epsilon\hbar^2}{m_e^*e^2} n^2 \quad (2.183)$$

Die Dielektrizitätskonstante von Silizium ist  $\epsilon \sim 10$  und die effektive Masse  $m_e^*/m_e \sim 0.3$ . Setzt man diese Werte in Gl. 2.182 und Gl. 2.183 ein, so erkennt man, daß die Bindungsenergie des Elektrons an dem Dotieratom



**Abbildung 2.35:** Lage des Fermi-Niveaus in Abhängigkeit von der Dotierung.

nur 40 meV beträgt und der Radius ca. 2 nm ist. D.h. das Elektron ist nur schwach gebunden und über mehrere Atome de-lokalisiert. Nur geringe thermische Anregungen reichen aus, um es zu einem Leitungsband-Elektron zu machen. D.h. das Energieniveau des Elektrons am Dotieratom Arsen liegt nahe an der Leitungsbandkante. Nachdem Elektronen an das Leitungsband abgegeben werden, spricht man von einem **Donatorniveau**.

### Ferminiveau in einem dotierten Halbleiter

Wo liegt jetzt das Fermi-Niveau in einem dotierten Halbleiter. Die Zahl der Elektronen, die sich im Leitungsband befinden werden durch eine Temperatur und ein Fermi-Niveau ausdrücken. Die Dichte an Leitungsband-Elektronen wird generell beschrieben durch:

$$n = \underbrace{2 \left( \frac{m_e k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2}}_{n_0} e^{-\frac{E_C - E_F}{k_B T}} \quad (2.184)$$

$n_0$  ist die sog. kritische Elektronendichte<sup>4</sup>.

<sup>4</sup>Bei dieser Dichte ist die mittlere Energie eines Elektrons in einem Fermigas  $\frac{3}{5}E_F$  gleich

Diese Elektronen im Leitungsband entstehen durch Ionisation eines Donatoratoms am Energieniveau  $E_D$ . Die Dichte der positiv ionisierten Donatoratome  $N_D^+$  berechnet sich aus der Dichte aller Donatoratome  $N_D$  gemäß:

$$N_D^+ = N_D \frac{1}{2} \left( 1 - \frac{1}{e^{\frac{E_D - E_F}{k_B T}} + 1} \right) \quad (2.185)$$

Der letzte Term ist der Anteil der Fermi-Dirac-Statistik ( $1 - f(E)$ ) der besagt, daß kein Elektron im Niveau des Donators sitzt. Der Faktor  $1/2$  berücksichtigt das statistische Gewicht dieses Niveaus, da es zwei Möglichkeiten gibt (Spin  $\pm 1/2$ ) das Elektron am Donatoratom zu belassen. Der Term ( $1 - f(E)$ ) läßt sich zu  $e^{\frac{E_D - E_F}{k_B T}}$  nähern.

Die Ionisation der Elektronen aus dem Donator-Niveau erzeugt Elektronen im Leitungsband. Demnach muß die Zahl der unbesetzten Donator-Niveaus  $N_D^+$  gleich der Elektronendichte im Leitungsband sein:

$$N_D^+ = n \quad (2.186)$$

Aus diesem Ausdruck läßt sich die Lage des Fermi-Niveau in einem dotierten Halbleiter bestimmen. Durch Auflösen von

$$n_0 e^{-\frac{E_c - E_F}{k_B T}} = \frac{1}{2} N_D e^{\frac{E_D - E_F}{k_B T}} \quad (2.187)$$

bekommt man

$$E_F = \frac{1}{2} (E_D + E_c) + \frac{1}{2} k_B T \ln \left( \frac{N_D}{2n_0} \right) \quad (2.188)$$

Man erkennt, daß bei  $T=0$  das Fermi-Niveau genau zwischen Leitungsband und Donatorniveau liegt. Nachdem generell  $2n_0 \gg N_D$  gilt, wird der Logarithmus negativ und bei Erhöhung der Temperatur schiebt sich das Fermi-Niveau immer weiter in Richtung Donatorniveau. Durch eine Erhöhung der Dotierung schiebt sich das Fermi-Niveau bei endlichen Temperaturen immer näher zur Leitungsbandkante.

## p Dotierung

Analog zur n-Dotierung läßt sich auch die p-Dotierung beschreiben. Das Niveau am Dotieratom wird jetzt von einem Elektron des Valenzbandes aufgefüllt. Man bezeichnet dies als **Akzeptorniveau**. Der frei gewordene Zustand im Valenzband kann für die Löcherleitung genutzt werden.

---

der mittleren Energie eines Elektrons in einem idealen Gas  $\frac{3}{2} k_B T$

Die Lage des Fermi-Niveaus ist wieder bei  $T=0$  in der Mitte zwischen Akzeptorniveau  $E_A$  und Valenzbandkante  $E_v$ :

$$E_F(T = 0) = \frac{1}{2} (E_A + E_v) \quad (2.189)$$

Die Ladungsträgerkonzentration in einem dotierten Halbleiter ist über einen weiten Bereich steuerbar. Mit steigender Temperatur nimmt zunächst wieder die Besetzung im Leitungsband zu, da zunehmend die besetzten Donator-Niveaus ionisiert werden. Ab einer bestimmten Temperatur sind diese Niveaus vollständig ionisiert und es tritt eine Sättigung ein. Erst bei sehr hohen Temperaturen wird die direkte thermische Anregung von Valenzband-Elektronen in das Leitungsband sichtbar und die Elektronendichte nimmt weiter zu.

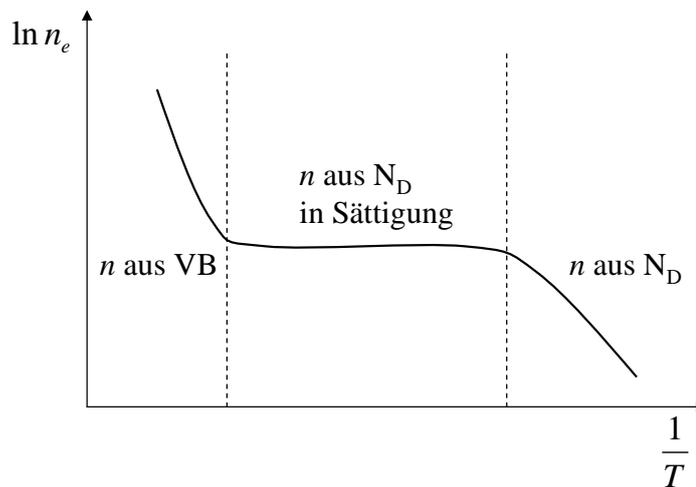


Abbildung 2.36: Ladungsträgerkonzentration.

### 2.6.4 pn Übergang

Fügt man einen **p**-dotierten und einen **n**-dotierten Halbleiter zusammen, so diffundieren Elektronen aus dem **n**-dotierten Bereich in den angrenzenden **p**-Bereich, um dort die Löcher aufzufüllen. Es entsteht eine **Raumladungszone** auf, da im **n**-dotierten Bereich die positiv geladenen Donatoratome verbleiben, während im **p**-dotierten Bereich ein Überschuss an Elektronen existiert bzw. die negativ geladenen Akzeptoratome nicht mehr durch die positiv geladenen Löcher kompensiert werden. Durch den Aufbau einer Raum-

ladungszone, wie in Abb. 2.37 skizziert entsteht ein elektrisches Feld, das der ursprünglichen Diffusion der Elektronen entgegen wirkt. Es kommt zu einem Gleichgewicht zwischen Elektronen-Diffusion und Drift im elektrostatischen Feld.

Dieses elektrostatische Bild kann auch mit einem Bandschema beschrieben werden. Nachdem im **n**-dotierten Bereich die Dichte an Elektronen sinkt, verschiebt sich das Fermi-niveau in Richtung Mitte der Bandlücke, d.h. der Abstand  $E_F$  zu  $E_c$  steigt. Im **p**-dotierten Bereich nimmt die Dichte der Löcher ab, da sie durch die diffundierenden Elektronen besetzt werden, was auch einer Verschiebung des Fermi-niveaus zur Mitte der Bandlücke entspricht. Die Tatsache, dass Elektronen in dem Material diffundieren, ist gleich bedeutend mit einem Gradienten in dem Fermi-niveau. Nachdem sich die Diffusion und die Drift in der Raumladungszone im Gleichgewicht aufheben, muß die Fermienergie über den pn-Übergang konstant bleiben. D.h. es verschieben sich im Bereich der Raumladungszone die Kanten von Leitungsband und Valenzband, wie in Abb. 2.37 dargestellt.

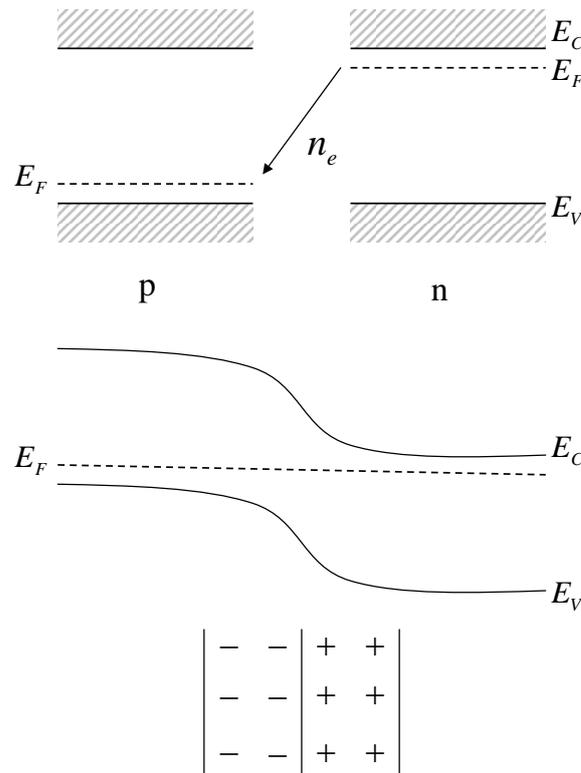


Abbildung 2.37: pn-Übergang.

## Diode

Ein pn Übergang hat gleichrichtende Eigenschaften und kann deshalb als Diode genutzt werden.

- **positive Spannung an p-dotierten Bereich**

Legt man eine positive Spannung an den **p**-dotierten Bereich an, so überlagert sich dem internen elektrischen Feld der Raumladungszone ein äußeres elektrisches Feld, das diesem entgegen wirkt. D.h. jetzt können die Elektronen aus dem **n**-dotierten Bereich den pn-Übergang überwinden und fließen in den **p**-dotierten Bereich. Diese Bewegung der Elektronen ist gleich bedeutend einem Unterschied der Fermi-niveaus auf beiden Seiten des pn-Übergangs, wie in Abb. 2.38 skizziert. Mit zunehmender positiver Spannung können mehr Elektronen die verbleibende Barriere überwinden und der Strom steigt exponentiell an. Ab einem gewissen Punkt ist der Verlauf des Leitungsbandes flach, da das äußere elektrische Feld das interne vollständig kompensiert und die Elektronen müssen keine Barriere mehr überwinden. Jetzt hängt der Strom nur noch von der Strom-Begrenzung der Spannungsversorgung ab.

- **negative Spannung an p-dotierten Bereich**

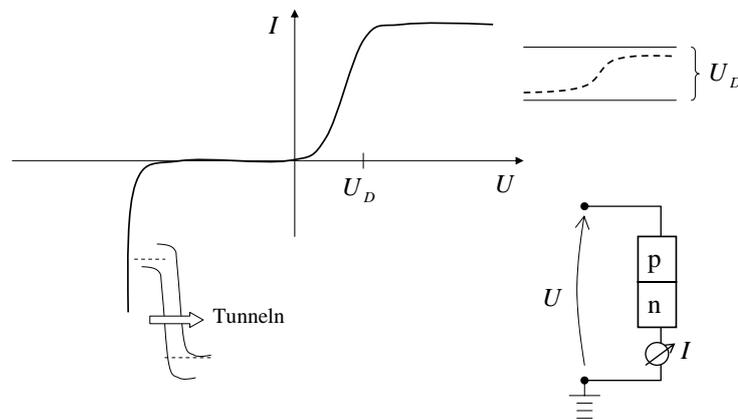


Abbildung 2.38: Diodenkennlinie.

Bei negativen Spannungen *verstärkt* das äußere elektrische Feld das interne elektrische Feld und es kann zunächst kein Strom fließen. D.h. das Bauteil hat gleichrichtende Eigenschaften, da nur bei einer Polarität Strom fließen kann. Erst ab einer sehr negativen Spannung können

Elektronen aus dem Valenzband des **p**-dotierten Bereiches *direkt* in das Leitungsband des **n**-dotierten Bereiches tunneln. Nachdem der Elektronentransport jetzt in die andere Richtung geschieht, beobachtet man einen Strom in entgegen gesetzter Richtung.

## Solarzelle

Ein pn-Übergang kann auch als Solarzelle dienen, die Photonen in elektrischen Strom umwandelt. Ein Photon regt ein Elektron vom Valenzband in das Leitungsband an, und ein Elektron-Loch-Paar entsteht. Geschieht diese Absorption innerhalb der Raumladungszone, so wird das Elektron von dem Loch durch das interne elektrische Feld getrennt und die Ladungsträger können zu den Kontakten hin abfließen, wie in Abb. 2.39 gezeigt. Elektron-Loch-Paare, die außerhalb der Raumladungszone erzeugt werden, rekombinieren sofort wieder und tragen nicht zum Strom bei. Wenn man den pn-Übergang außen kurz schließt, entsteht ein Stromfluß (obwohl von außen keine Spannung angelegt wurde). Diesen Strom bei  $U = 0$  bezeichnet man als Kurzschlußstrom. Die Diodenkennlinie wird durch Beleuchtung nach unten verschoben.

Schließt man einen Verbraucher mit einem endlichen Widerstand  $R$  an, so fällt eine Spannung  $U$  über diesen Widerstand ab, falls Licht auf die Solarzelle fällt. Wählt man den Widerstand unendlich, so kann kein Strom fließen und es stellt sich bei Beleuchtung ein bestimmter Spannungsabfall außen ein. In diesem Zustand ist die Leitungs- und Valenzbandkante im Bereich des pn-Übergangs flach und die Raumladungszone verschwindet. Die erzeugten Elektron-Loch-Paare werden jetzt nicht mehr durch ein internes elektrisches Feld getrennt und rekombinieren sofort wieder. Die entsprechende Spannung bezeichnet man als Offen-Spannung.

Bei gegebener Auslegung des Widerstandes des Verbrauchers, der von einer Solarzelle gespeist wird, entsteht eine Spannung und ein Strom im äußeren Stromkreis des beleuchteten pn-Übergangs (Arbeitspunkt AP in Abb. 2.39). Die Leistung, die die Solarzelle abgibt, ist das Produkt aus Spannung und Strom. D.h. ein Optimum ist erreicht wenn der vierte Quadrant der Kennlinie optimal gefüllt ist, wie Abb. 2.39 verdeutlicht.

## 2.7 Supraleitung (Vertiefung)

Als Spezialfall der Beschreibung von Elektronen im Festkörper sei im folgenden das Phänomen der Supraleitung diskutiert.

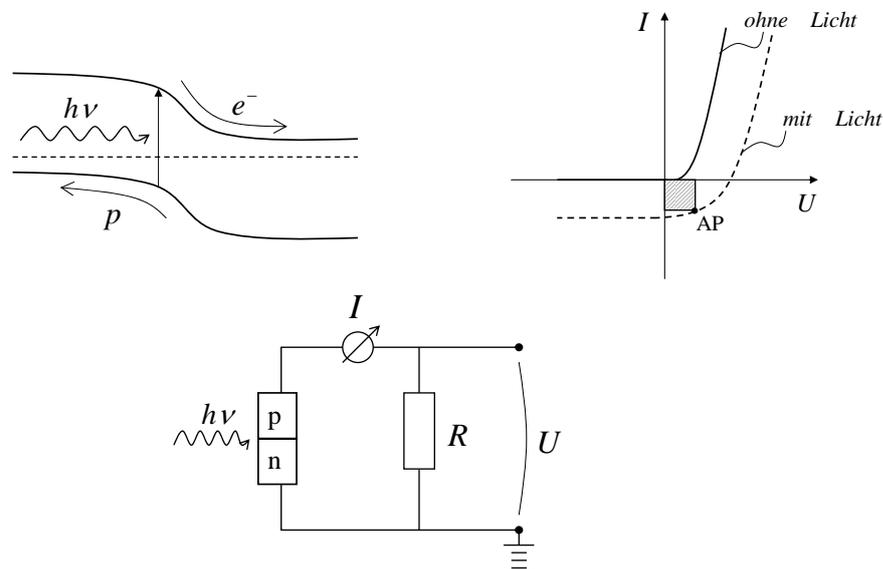


Abbildung 2.39: Solarzelle.

### 2.7.1 Phänomenologie

Betrachten wir zunächst einige allgemeine Beobachtungen und Erkenntnisse zum Phänomen der Supraleitung.

- **elektrischer Widerstand = 0**

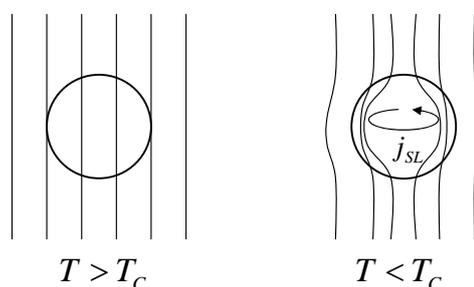
Supraleitung zeichnet sich dadurch aus, daß beim Abkühlen eines Festkörpers unterhalb einer kritischen Temperatur  $T_c$  der elektrische Widerstand vollständig verschwindet. Dies wurde zum ersten mal 1911 für Quecksilber beobachtet.

- **Meißner-Effekt**

Zusätzlich zum verschwindenden Widerstand wird ein Magnetfeld aus dem Supraleiter verdrängt, der Meißner-Effekt. Dies gelingt nur bis zu einer kritischen Magnetfeldstärke  $B_c$ , da bei höheren Feldern der supraleitende Zustand unterdrückt wird.

Das Verdrängen des Magnetfeldes aus einem Supraleiter wird durch einen diamagnetischen supraleitenden Strom hervorgerufen, der das äußere Magnetfeld abschirmt (Abb. 2.40).

Trägt man die kritische Magnetfeldstärke über der Temperatur auf, so beobachtet man eine charakteristische Abhängigkeit, wie sie in Abb.



**Abbildung 2.40:** Meißner-Effekt. Unterhalb einer kritischen Temperatur  $T_c$  wird ein Magnetfeld aus einem Supraleiter verdrängt, da ein supraleitender Strom  $j_{SL}$  das Feld kompensiert.

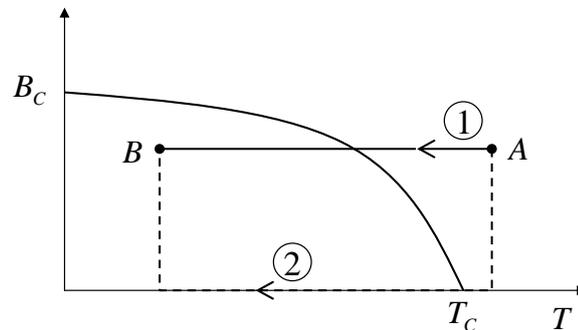
2.41 gezeigt ist. An dieser läßt sich auch verdeutlichen, daß ein Supraleiter nicht *nur* ein Material mit Widerstand  $R=0$  ist. Dazu betrachten wir zwei Zustände A (normal leitend) und B (supra leitend). Bei Weg (1) wird bei konstantem Magnetfeld die Temperatur erniedrigt, während bei Weg (2) zunächst das Magnetfeld ausgeschaltet, die Temperatur erniedrigt, und dann das Magnetfeld wieder eingeschaltet wird. Ein Leiter mit Widerstand  $R = 0$  verdrängt nur auf Weg (2) das Magnetfeld, da sich der supraleitende Strom zur Abschirmung des äußeren Magnetfeld per Induktion beim wieder Einschalten des Magnetfeldes aufbaut. Auf Weg (1) kann das Magnetfeld in den Leiter mit  $R=0$  eindringen. Dies gilt allerdings nicht für einen echten Supraleiter, der einen Phasenübergang zwischen dem normal- und supraleitenden Zustand durchläuft, bei dem unabhängig vom Weg immer das Magnetfeld verdrängt wird.

- **Isotopeneffekt**

Betrachtet man supraleitende Materialien, so beobachtet man, daß die Sprungtemperatur der einzelnen Isotope eines Elements mit der Atommasse wie  $M^{-\frac{1}{2}}$  skaliert.

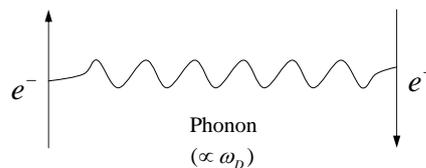
$$T_c \sim M^{-\frac{1}{2}} \quad (2.190)$$

Dies läßt sich wie folgt verstehen: im supraleitenden Zustand koppeln Elektronen untereinander durch die Wechselwirkung mit den Phononen. Es bilden sich sog. **Cooperpaare**, bei denen jeweils zwei Elektronen mit anti-parallem Spin ein Paar bilden (siehe Abb. 2.42). Damit



**Abbildung 2.41:** Die kritische Feldstärke, bei der die Supraleitung durch ein äußeres Magnetfeld unterdrückt wird, steigt mit sinkender Temperatur. Ein Supraleiter ist *kein* Leiter mit Widerstand  $R = 0$ , da unabhängig vom Weg (1) oder (2) immer das Magnetfeld heraus gedrängt wird. Ein Leiter mit Widerstand  $R = 0$  verdrängt nur dann das Magnetfeld, wenn die Änderung gemäß Weg (2) erfolgt.

werden diese Teilchen Bosonen und können einen supraleitenden Zustand makroskopisch besetzt. Die Kopplung von zwei Elektronen hängt von der Stärke der Wechselwirkung durch die Phononen ab. Ein Maß für die Energie dieser Phononen ist die Debye-Frequenz  $\omega_D$  die mit  $M^{-\frac{1}{2}}$  skaliert. D.h. ist die Kopplung stark, benötigt man höhere Temperaturen, um die Bindung der Elektronenpaare aufzubrechen.



**Abbildung 2.42:** In einem Cooperpaar koppeln zwei Elektronen mit antiparallelem Spin durch die Wechselwirkung mit den Phononen des Gitters.

Dieses Modell der Cooperpaare erklärt auch anschaulich den Einfluss der kritischen Magnetfeldstärke. In einem äußeren Magnetfeld ist die parallele Ausrichtung der Spins der Elektronen günstiger. Demnach zerstört ein starkes äußeres Magnetfeld die Supraleitung.

- schlechter Leiter = guter Supraleiter

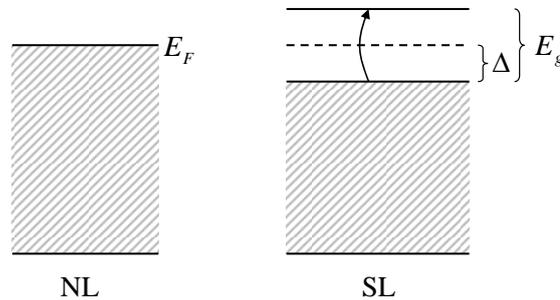
Vor diesem Hintergrund ist auch einsichtig, daß ein schlechter Normalleiter grundsätzlich ein guter Supraleiter sein kann, da die Kopplung von zwei Elektronen durch Phonon wichtig ist. Im normal leitenden Zustand reduzieren die Elektronen-Phonon-Stöße die Leitfähigkeit, während sie im supra leitenden Zustand Voraussetzung für  $R=0$  ist.

- **makroskopischer Quantenzustand**

Ein Cooperpaar kann als Boson aufgefasst werden, da der Gesamtspin gleich Null ist. Dadurch kann dieser supraleitende Zustand mit einer makroskopischen Zahl von Cooperpaaren besetzt werden, ähnlich zur Bose-Einstein Kondensation.

### 2.7.2 Energielücke

Der supraleitende Zustand besitzt eine Energielücke  $E_g$  an der Fermikante, die die Elektronen im supraleitenden Zustand von den Elektronen im normalleitenden Zustand trennt (siehe Abb. 2.43). Die Zustandsdichte der Elektronen im supraleitenden Zustand ist:



**Abbildung 2.43:** Im supraleitenden Zustand entsteht eine Energielücke an der Fermienergie.

$$N_{SL}(E - E_F) = N_{NL}(E_F) \frac{|E - E_F|}{\sqrt{(E - E_F)^2 - \Delta^2}} \quad (2.191)$$

### 2.7.3 Supraleiter im Magnetfeld

#### Eindringtiefe $\lambda_L$

Die Abschirmung eines äußeren Magnetfeldes durch den Supraleiter wird durch einen diamagnetischen Strom gewährleistet. In einem Normalleiter ist

die Stromdichte mit einem angelegten elektrischen Feld verknüpft  $j = \sigma E$ . Da in einem Supraleiter die Leitfähigkeit  $\sigma$  unendlich ist, ist dieser Ansatz zur Beschreibung der Stromdichte in einem Supraleiter nicht möglich. Es läßt sich allerdings ein äquivalenter Ausdruck ableiten. Zunächst gilt das Ampersche Gesetz:

$$\nabla \times \vec{B} = \mu_0 \vec{j} \quad (2.192)$$

Das Vektorpotential  $\vec{A}$  ist gemäß  $\vec{B} = \nabla \times \vec{A}$  definiert. Damit kann man schreiben:

$$\nabla \times \vec{B} = \nabla \times (\nabla \times \vec{A}) = \nabla \left( \underbrace{\nabla \cdot \vec{A}}_{=0} \right) - \nabla^2 \vec{A} \quad (2.193)$$

damit ist das Vektorpotential  $\vec{A}$  wegen Gl. 2.192 lokal mit der Stromdichte verknüpft, wie

$$-\nabla^2 \vec{A} = \mu_0 \vec{j} \quad (2.194)$$

Diese Gleichung läßt sich linearisieren mit einer charakteristischen Länge  $\lambda_L$ :

$$-\frac{\vec{A}}{\lambda_L^2} = \mu_0 \vec{j} \quad (2.195)$$

und man bekommt die sogenannte **London-Gleichung**

$$\boxed{\vec{j} = -\frac{1}{\mu_0 \lambda_L^2} \vec{A}} \quad (2.196)$$

Sie verbindet die lokale Stromdichte mit dem Vektorpotential und ersetzt damit  $j = \sigma E$ . Setzt man diese wieder in Gl. 2.192 ein, so erhält man:

$$\nabla \times (\nabla \times \vec{B}) = \mu_0 (\nabla \times \vec{j}) \quad (2.197)$$

bzw.

$$-\nabla^2 \vec{B} = -\mu_0 \frac{1}{\mu_0 \lambda_L^2} \underbrace{(\nabla \times \vec{A})}_{=\vec{B}} \quad (2.198)$$

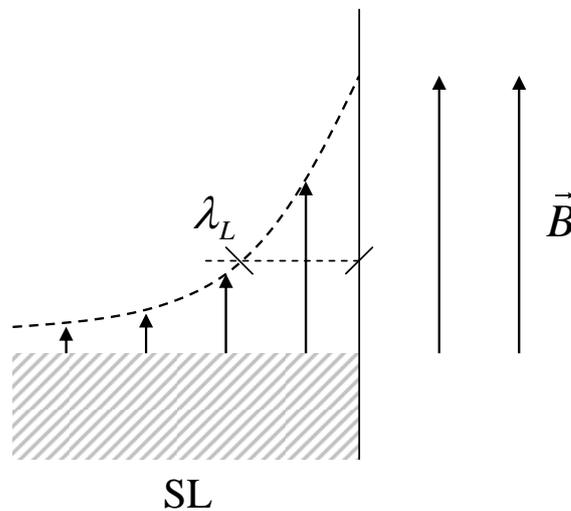
Damit wird die Bestimmungsgleichung für das Magnetfeld:

$$\boxed{\nabla^2 \vec{B} = \frac{\vec{B}}{\lambda_L^2}} \quad (2.199)$$

Diese Gleichung hat keine kontinuierlichen Lösungen. Betrachtet man die Grenzfläche eines Supraleiters in einem äußeren Magnetfeld, so ergeben sich Lösungen der Form:

$$B(x) = B_0 e^{-\frac{x}{\lambda_L}} \quad (2.200)$$

D.h. ein äußeres Magnetfeld wird über eine charakteristische Länge  $\lambda_L$  abgeschirmt, wie in Abb. 2.44 verdeutlicht. Innerhalb dieser Abfalllänge fließen die Supraströme, um das äußere Feld abzuschirmen.



**Abbildung 2.44:** Magnetfelder dringen über eine charakteristische Länge  $\lambda_L$  in einen Supraleiter ein.

### Flußquantisierung

Betrachten wir im folgenden einen supraleitenden Ring in einem äußeren Magnetfeld. Die Geschwindigkeit der Elektronen läßt sich ableiten aus der Pauli-Gleichung:

$$\vec{v} = \frac{\vec{p}}{m} = \frac{1}{m} \left( -i\hbar\nabla + q\vec{A} \right) \quad (2.201)$$

Die Stromdichte berechnet sich zu

$$j = q\langle v \rangle = q\Psi^* v \Psi \quad (2.202)$$

hier bezeichnet  $\Psi$  die Wellenfunktion, die den makroskopischen Zustand beschreibt. Hierfür wählen wir den allgemeinen Ansatz:

$$\Psi = n^{1/2} e^{i\Theta(r)} \quad (2.203)$$

mit  $n$  der Dichte der Elektronen im supraleitenden Zustand und  $\Theta$  der Phase. Dieser Ansatz ist sinnvoll, da die Supraleitung ein makroskopisch besetzter Quantenzustand ist. D.h. auch über makroskopische Dimensionen ist die Phasenbeziehung eindeutig. Setzt man diesen Ansatz ein, so erhält man:

$$j = q \frac{n}{m} \left( \hbar \nabla \Theta(r) + q \vec{A} \right) \quad (2.204)$$

Im Inneren des supraleitenden Ringes fließt *kein* Strom, da nur an dessen Oberfläche der Suprastrom das Magnetfeld abschirmt. D.h. auf einer Kurve  $C$  innerhalb des supraleitenden Ringes (vgl. Abb. 2.45) ) muß  $j = 0$  gelten. Damit bekommen wir

$$-\hbar \nabla \Theta(r) = q \vec{A} \quad (2.205)$$

Integrieren wir diese Gleichung über die Kurve  $C$ , so muß die Änderung der Phase des makroskopischen Quantenzustandes nach einem Umlauf ein Vielfaches von  $2\pi$  sein:

$$\int_C \nabla \Theta dl = 2\pi s \quad (2.206)$$

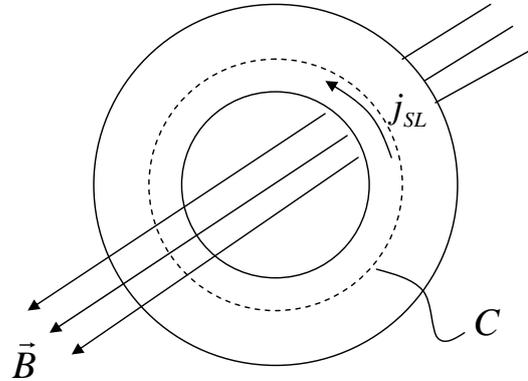
mit  $s$  einer ganzen Zahl. Das Linienintegral von  $\nabla \times \vec{A}$  über die Kurve  $C$  ergibt gleichzeitig den magnetischen Fluß durch den Ring  $\Phi$  nach dem Stokes'schen Satz:

$$\int_C \vec{A} dl = \int_A \nabla \times \vec{A} dA = \int_A \vec{B} dA = \Phi \quad (2.207)$$

Hier bezeichnet  $A$  die von der Kurve  $C$  umschlossene Fläche. Damit erhalten wir schließlich:

$$\int_C -\frac{\hbar}{q} \nabla \Theta dl = -\frac{\hbar}{q} 2\pi s = \Phi \quad (2.208)$$

Damit zeigt sich, daß der magnetische Fluß durch diesen Ring keine *beliebigen* Werte annehmen kann, sondern nur quantisiert vorliegt. Ein Vergleich mit den Experimenten zeigt, daß die Einheit der Ladung  $q$  zwei Elektronen entspricht. Mit  $q = -2e$  ergibt sich schließlich:



**Abbildung 2.45:** Der magnetische Fluß, der durch einen supraleitenden Ring tritt, ist quantisiert.

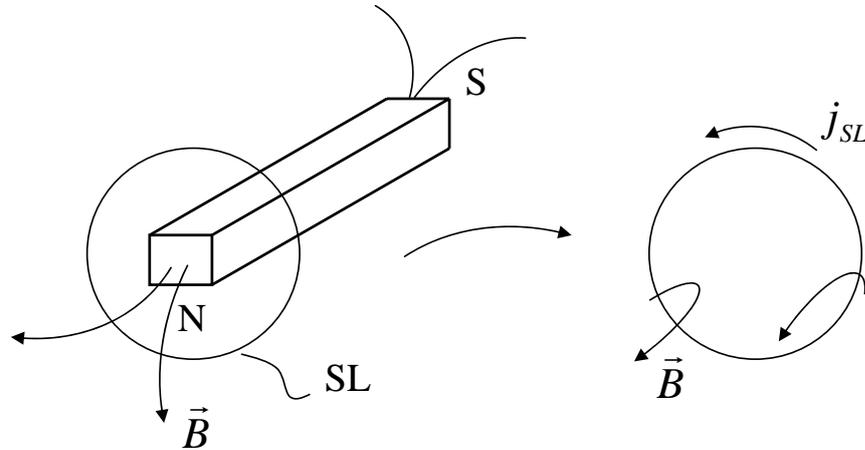
$$\Phi = \underbrace{\frac{h}{2e}}_{\Phi_0} s \quad \text{mit} \quad \Phi_0 = 2 \cdot 10^{-11} \text{Tcm}^2 \quad (2.209)$$

$\Phi_0$  bezeichnet man als **Flußquant**.

Am Beispiel eines supraleitenden Ringes kann man auch verdeutlichen, wie ein Dauersrom in einem Supraleiter erzeugt werden kann. Zunächst wird ein Magnetfeld einem *normal leitenden* Supraleiter ( $T > T_c$ ) überlagert. Nach dem Abkühlen unterhalb der kritischen Temperatur schaltet man das äußere Magnetfeld ab und ein supraleitender Strom wird angeworfen, der den magnetischen Fluß durch die Fläche erhält. Dieser Strom klingt nicht ab sondern fließt dauerhaft. Über diese Methode läßt sich sehr genau nachweisen, daß der Widerstand eines Supraleiters exakt  $R=0$  ist.

### 2.7.4 Supraleiter 1. / 2. Art

Prinzipiell existieren zwei Klassen von Supraleitern, die sich in der Art der Abschirmung eines äußeren Magnetfeldes unterscheiden. Dazu betrachten wir zunächst den Übergang zwischen einem normal-leitenden zu einem supraleitenden Bereich eines Supraleiters, zum Beispiel, die äußere Grenzfläche. Nachdem der supraleitende Zustand energetisch günstiger ist, ändert sich die kinetische Energie eines Elektrons, das vom normal leitenden in den supraleitenden Zustand übergeht. Dabei ändert sich die Wellenzahl der Elektronenwelle von  $k$  auf  $k+q$ . Die kinetische Energie sei in den beiden Bereichen



**Abbildung 2.46:** Ein Dauerstrom in einem Supraleiter kann generiert werden, indem man zunächst ein Magnetfeld einem *normal leitenden* Supraleiter ( $T > T_c$ ) überlagert. Nachdem Abkühlen unter die kritische Temperatur, schaltet man das äußere Magnetfeld ab und ein supraleitender Strom wird angeworfen, der den magnetischen Fluß durch die Fläche erhält.

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad \text{normal leitend} \quad (2.210)$$

$$E = \frac{\hbar^2 (k + q)^2}{2m} \quad \text{supra leitend} \quad (2.211)$$

Bei dem Übergang eines Elektrons von einem Bereich in den anderen muß sich die kinetische Energie entsprechend dem Betrag

$$\Delta E = \frac{\hbar^2}{2m} 2kq \quad (2.212)$$

ändern, wobei der Term proportional zu  $q^2$  vernachlässigt wurde. Diese Änderung der kinetischen Energie darf nicht größer sein als die Energielücke, da sich sonst nicht der supraleitende Zustand einstellt. D.h. man kann eine obere Grenze für diese Energieänderung angeben zu:

$$\frac{\hbar^2}{m} k_F q_0 = E_g \quad (2.213)$$

der Wellenvektor  $q$  beschreibt eine charakteristische Länge  $\xi_0 = \frac{1}{q}$ , über die sich die Wellenfunktion der Elektronen ändert. Diese Länge bezeichnet

man als **Kohärenzlänge**, da sie die minimale räumliche Ausdehnung des supraleitenden Zustandes angibt. Diese Kohärenzlänge ergibt mit  $\hbar k_f = m v_F$ :

$$\xi_0 = \frac{\hbar v_F}{E_g} \quad (2.214)$$

Der Vergleich zwischen der Kohärenzlänge  $\xi_0$  und der Eindringtiefe  $\lambda_L$  legt jetzt die Art des Eindringens des Magnetfeldes fest.

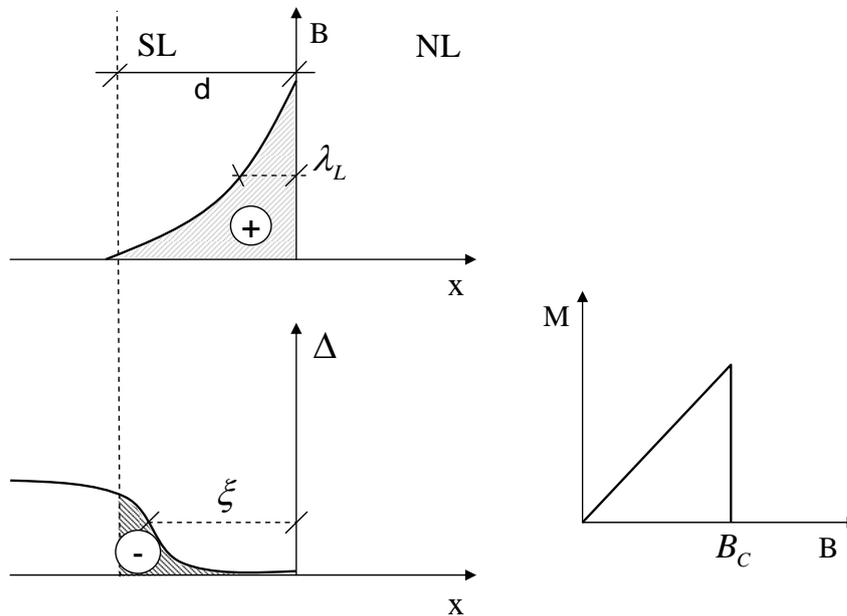
- **Supraleiter 1. Art**

Bei sog. Supraleitern 1. Art ist die Kohärenzlänge  $\xi_0$  *größer* als die Eindringtiefe  $\lambda_L$ . Dadurch wird die Grenzflächenenergie auf einem Flächenelement der Größe  $A$  positiv (siehe Abb. 2.47): der Bereich des eindringenden Magnetfeldes an der Grenzfläche ist ein positiver Beitrag zur Grenzflächenenergie entsprechend  $B^2$  und einem Volumen  $\lambda_L A$ . Der Bereich des Übergangs zwischen normal-leitendem Zustand zum supra-leitenden Zustand entspricht einem negativen Beitrag zur Grenzflächenenergie, da der supraleitende Zustand energetisch günstiger ist. Das Volumen ist  $\xi_0 A$ . Bei einem Supraleiter erster Art überwiegt der Term  $\propto B^2 \lambda_L A$  und das System versucht die Grenzfläche zu minimieren, d.h. nur auf der Außenseite eines Supraleiters dringt das Magnetfeld ein. Vergleicht man die Magnetisierung des Supraleiters, so steigt sie linear mit dem äußeren Magnetfeld an-perfekter Diamagnetismus.

- **Supraleiter 2. Art**

Bei einem Supraleiter zweiter Art ist die Kohärenzlänge  $\xi_0$  sehr viel *kürzer* als die Eindringtiefe  $\lambda_L$ . Hier kann die Grenzflächenenergie negativ werden (siehe Abb. 2.49): d.h. das System versucht die Grenzfläche zu maximieren. Hierbei dringt das Magnetfeld in Form von kleinen Flußschläuchen in den Supraleiter ein, die kleinen normal leitenden Bereichen entsprechen, die von einem supra leitenden Strom umgeben sind, der diesen Flußschlauch von dem umgebenen supra leitende Material abschirmt (siehe Abb. 2.48).

Bei kleinen äußeren Magnetfeldern verhält sich dieser Supraleiter noch wie ein Supraleiter erster Art. Der Bereich der Oberfläche der für die Energiebilanz zur Grenzflächenenergie herangezogen wird, ist klein, da die absolute Länge, über die das Magnetfeld eindringt, noch klein ist. Ab einer bestimmten Magnetfeldstärke  $B_{c,1}$  wird die Grenzflächenenergie negativ und die Grenzfläche wird maximiert, Flußschläuche treten in den Supraleiter ein. Bei einer weiteren kritische Magnetfeldstärke  $B_{c,2}$  ist der Supraleiter vollständig mit Flußschläuchen

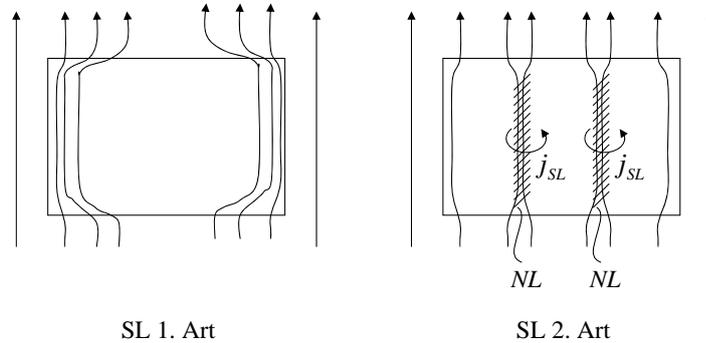


**Abbildung 2.47:** Bei einem Supraleiter 1. Art ist die Eindringtiefe  $\lambda_L$  des Magnetfeldes *kleiner* als die Kohärenzlänge  $\xi_0$ . Damit wird die Oberflächenenergie positiv und das System versucht die Grenzfläche zwischen Normalleiter und Supraleiter zu *minimieren*. Die Magnetisierung zeigt streng dia-magnetisches Verhalten bis zur kritischen Feldstärke  $B_c$ .

ausgefüllt, deren minimaler Abstand genau der Kohärenzlänge  $\xi_0$  entspricht. Bei noch höheren Feldstärken bricht dann die Supraleitung zusammen.

### 2.7.5 Josephson-Effekte

Zwei Supraleiter seien durch einen dünnen normal leitenden Bereich verbunden. Die Dicke dieser Verbindung muß so klein sein, daß Cooperpaare von einem Supraleiter in den anderen tunneln können. Man spricht von einem **Josephson-Kontakt**. Je nach Beschaltung lassen sich mehrere Effekte beobachten, die alle von der jeweiligen Phase des makroskopischen Quantenzustandes in den beteiligten Supraleitern abhängen.



**Abbildung 2.48:** Bei einem Supraleiter 2. Art dringt das Magnetfeld in Form kleiner Flußschläuche in das Material ein.

### Gleichstrom

Betrachten wir zunächst einen einzelnen Josephson Kontakt. Der Ansatz der Wellenfunktion in beiden Bereichen ist:

$$\Psi_1 = n_1^{1/2} e^{i\Theta_1} \quad (2.215)$$

$$\Psi_2 = n_2^{1/2} e^{i\Theta_2} \quad (2.216)$$

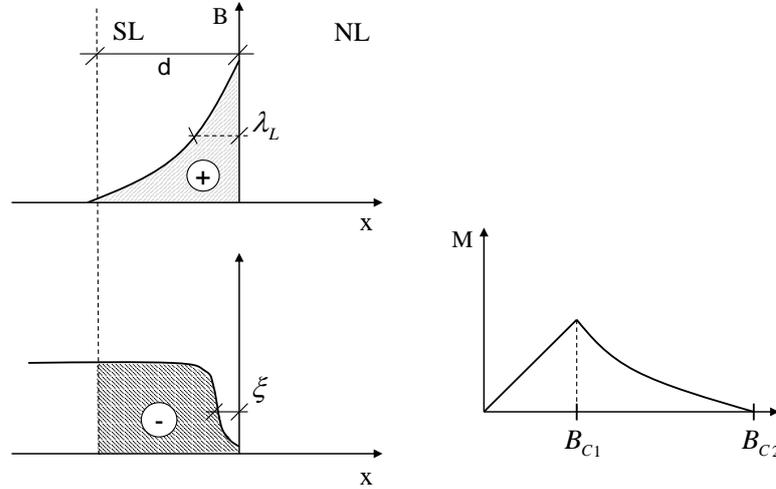
mit  $n_1$  und  $n_2$  den Elektronendichten, und  $\Theta_1$  und  $\Theta_2$  den jeweiligen Phasen. Der Übergang von Cooperpaaren von einem Bereich zum anderen sei durch eine Transmissionsrate  $T$  gekennzeichnet. Dadurch ändert sich die jeweilige Wellenfunktion bzw. Energie des elektronischen Systems im Supraleiter. Die Änderung der Wellenfunktion ist durch die zeitabhängige Schrödingergleichung gegeben:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = H\Psi \quad (2.217)$$

mit  $H$  dem Hamilton-Operator des Systems. Diese Änderung der Wellenfunktion  $\Psi_1$  und  $\Psi_2$  durch Transmission von Cooperpaaren, die jeweils durch  $\Psi_2$  und  $\Psi_1$  beschrieben werden, ist:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_1 = \hbar T \Psi_2 \quad (2.218)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_2 = \hbar T \Psi_1 \quad (2.219)$$



**Abbildung 2.49:** Bei einem Supraleiter 2. Art ist die Eindringtiefe  $\lambda_L$  des Magnetfeldes *größer* als die Kohärenzlänge  $\xi$ . Damit wird die Oberflächenenergie negativ und das System versucht, die Grenzfläche zwischen Normalleiter und Supraleiter zu *maximieren*. Die Magnetisierung zeigt zunächst dia-magnetisches Verhalten bis zur kritischen Feldstärke  $B_{c,1}$ . Ab dieser Feldstärke beginnt das Feld einzudringen in den Supraleiter in der Form von kleinen Flußschläuchen und erst ab einer Feldstärke  $B_{c,2}$  bricht die Supraleitung komplett zusammen.

Setzt man den Ansatz 2.215 und 2.216 ein, so bekommt man:

$$\frac{\partial \Psi_1}{\partial t} = \frac{1}{2} n_1^{-1/2} e^{i\Theta_1} \frac{\partial n_1}{\partial t} + i \Psi_1 \frac{\partial \Theta_1}{\partial t} = -iT \Psi_2 \quad (2.220)$$

analog dazu eine Gleichung für  $\Psi_2$ . Das läßt sich auflösen zu:

$$\frac{1}{2} \frac{\partial n_1}{\partial t} + i n_1 \frac{\partial \Theta_1}{\partial t} = -iT (n_1 n_2)^{1/2} e^{i(\Theta_2 - \Theta_1)} \quad (2.221)$$

Der Vergleich von Real- und Imaginärteil ergibt:

$$\frac{\partial n_1}{\partial t} = 2T (n_1 n_2)^{1/2} \sin(\Theta_2 - \Theta_1) \quad (2.222)$$

In Kombination mit der Gleichung für  $\Psi_2$  ergibt sich:

$$\frac{\partial n_1}{\partial t} = -\frac{\partial n_2}{\partial t} \quad (2.223)$$

d.h. die Abnahme der Elektronendichte auf einer Seite ist gleich der Zunahme auf der anderen Seite des Josephson-Kontaktes. Ein Strom  $j$  fließt, da  $\frac{\partial n_1}{\partial t} \propto j$  gilt. Man bekommt einen Gleichstrom in Abhängigkeit von der Phase  $\delta$  zwischen den beiden makroskopischen Quantenzuständen:

$$j = j_0 \sin(\Theta_2 - \Theta_1) = j_0 \sin(\delta) \quad (2.224)$$



**Abbildung 2.50:** Bei einem Josephson-Kontakt werden zwei Supraleiter über einen normal leitenden Bereich verbunden. Durch diesen Bereich können Cooper-Paare tunneln.

## Wechselstrom

Betrachten wir jetzt den Fall, daß eine Spannung  $V$  zwischen den beiden Supraleitern anliegt. Die potentielle Energie der beiden Supraleiter unterscheidet sich um  $qV$ , mit  $q$  der Ladung der Ladungsträger. Da für Cooperpaare  $q = -2e$  gilt, sei die potentielle Energie in einem Supraleiter um  $-eV$  und im anderen um  $+eV$  verschoben. Damit ergibt sich:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_1 = \hbar T \Psi_2 - eV \Psi_1 \quad (2.225)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_2 = \hbar T \Psi_1 + eV \Psi_2 \quad (2.226)$$

Setzen wir wieder den Ansatz 2.215 und 2.216 ein, so erhalten wir schließlich:

$$j = j_0 \sin\left(\delta - \frac{2eV}{\hbar} t\right) \quad (2.227)$$

D.h. legen wir eine Spannung an einen Josephson Kontakt an, so beobachtet man einen Wechselstrom. Dies läßt sich auch umkehren. Wenn man eine Hochfrequenz auf einen Josephson-Kontakt einstrahlt, so beobachtet

man eine Gleichspannung, wobei  $1\mu\text{V}$  ca.  $483.6\text{ MHz}$  entsprechen. Mit dieser Methode lassen sich aus einer Frequenz- und Spannungsmessung sehr genaue Werte für  $\frac{e}{h}$  ermitteln.

### Quanteninterferenz

Die Tatsache, daß der Strom über einen Josephson-Kontakt von der Phasenbeziehung der beiden supraleitenden Zustände abhängt, kann man sich in einem Interferenz-Versuch zunutze machen. Dazu verwendet man einen supraleitenden Ring, der an zwei Stellen durch einen Josephson-Kontakt unterbrochen ist, wie in Abb. 2.51 gezeigt. Die zwei Hälften sind jeweils kontaktiert. Durch den Ring tritt ein magnetischer Fluß  $\Phi$ . Dieser muß quantisiert sein gemäß:

$$\Phi = \frac{h}{2e} s \quad (2.228)$$

damit die Phasenänderung  $\delta$  ein Vielfaches von  $2\pi$  ist ( $\delta = 2\pi s$ ). Bei einem Umlauf um den supraleitenden Ring ist damit die gesamte Phasenänderung wieder:

$$\delta = \frac{2e}{h} \Phi \quad (2.229)$$

Auf der einen Seite des Ringes wird ein Strom eingespeist, der auf dem Weg a oder auf dem Weg b zum Kontakt auf der anderen Seite abfließen kann (siehe Abb. 2.51). Die Phasenverschiebung des Stromes auf dem Weg a setzt sich aus dem Beitrag des Josephson-Kontaktes  $\delta_0$  und aus dem Beitrag der Flußquantisierung  $1/2 \cdot \delta$  zusammen<sup>5</sup>. Demnach ergeben sich die Phasenverschiebungen auf den Wegen a und b,  $\delta_a$  und  $\delta_b$  zu:

$$\delta_a = \delta_0 + \frac{e}{h} \Phi \quad (2.230)$$

$$\delta_b = \delta_0 - \frac{e}{h} \Phi \quad (2.231)$$

$$(2.232)$$

im Weg a muß die Phase mit  $+\frac{e}{h}\Phi$  und im Weg b mit  $-\frac{e}{h}\Phi$  gezählt werden, da das Wegstrecken-Element einmal in Richtung des Stromes (a) und einmal entgegen (b) gezählt wird. Die gesamte Phase bei einem kompletten Umlauf ist  $\delta = \delta_a - \delta_b$ , was wieder  $\delta = \frac{2e}{h}\Phi$  ergibt. Der Gesamtstrom setzt sich aus

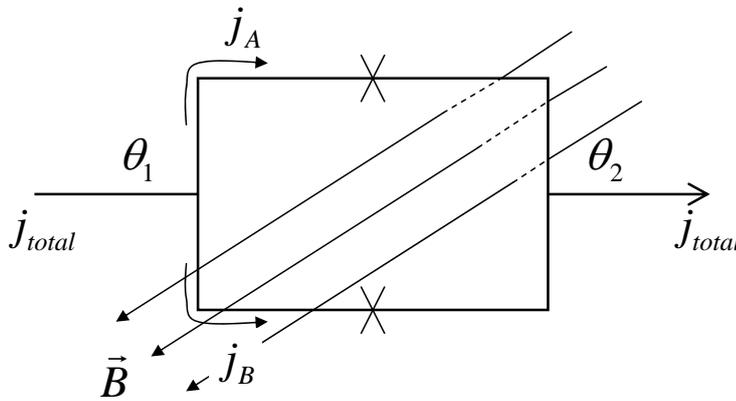
<sup>5</sup>Der Faktor  $1/2$  berücksichtigt, daß man auf dem Weg a nur zur Hälfte um den Ring geht.

den zwei Teilströmen  $j_a$  und  $j_b$  zusammen (entsprechend dem Gleichstrom-Josephson-Effekt):

$$j_{total} = j_0 \left[ \underbrace{\sin\left(\delta_0 + \frac{e}{\hbar}\Phi\right)}_{j_a} + \underbrace{\sin\left(\delta_0 - \frac{e}{\hbar}\Phi\right)}_{j_b} \right] \quad (2.233)$$

Dies ergibt schließlich:

$$j_{total} = 2j_0 \sin \delta_0 \cos \frac{e}{\hbar}\Phi \quad (2.234)$$



**Abbildung 2.51:** Bei einem SQUID (Supraconducting Quantum Interference Device) wird eine Schleife mit zwei Josephson-Kontakten aufgebaut. Wegen der Flußquantisierung oszilliert der Strom  $j_{total}$  mit der Änderung eines äußeren Magnetfeldes  $\vec{B}$ .

Man erkennt, daß der Strom bei einer Variation des magnetischen Flusses durch den Ring oszilliert. Diese Oszillation geschieht in Einheiten des Flußquants von  $10^{-11}$  Tcm<sup>2</sup>. D.h. sehr kleine bzw. sehr genaue Messungen des magnetischen Feldes sind damit möglich. Prominentes Beispiel sind die Messungen von Hirnströmen mittels der Quanteninterferenz-Detektoren.

Ein Signal wird nur beobachtbar, wenn sich der magnetische Fluß durch die Schleife ändert. Da die Schleife durch normal leitende Bereiche unterbrochen ist, können Flußquanten durch diese aus dem Inneren heraus- bzw. hinein treten. Wären diese normal leitenden Bereiche nicht vorhanden, könnte sich der magnetische Fluß im Innern *nicht* ändern, da der Supraleiter ein perfekter Diamagnet ist, der das Eindringen von weiteren Flußquanten durch Erhöhen des supraleitenden Stromes immer kompensieren kann.

## 2.8 Magnetismus (Vertiefung)

Magnetismus beschreibt das magnetische Verhalten eines Festkörpers. Man unterscheidet Dia-, Para und Ferromagnetismus. Ein diamagnetischer Festkörper wird von einem Magneten abgestoßen, da sich die Magnetisierung des Materials entgegen des äußeren Feldes ausrichtet. Beim Paramagnetismus wird der Festkörper angezogen, da sich die Magnetisierung des Materials in Richtung des äußeren Feldes ausrichtet. Beim Ferromagnetismus führt schließlich die Kopplung der magnetischen Momente der Atome untereinander zur Ausbildung einer spontanen Magnetisierung unabhängig vom Anlegen eines äußeren Feldes.

### 2.8.1 Diamagnetismus

Das Ändern eines äußeren Magnetfeldes induziert in einem diamagnetischen Material Ströme, die versuchen das Innere des Festkörpers von dem Magnetfeld abzuschirmen. Der diamagnetische Beitrag der Valenz- und Leitungselektronen wird im folgenden diskutiert.

- **Valenzelektronen**

Betrachten wir zunächst gebundene Elektronen in den Atomen des Festkörpers. Wegen der Quantisierung des Bahndrehimpulses  $\vec{l}$  ist die Projektion des Drehimpulses auf die Magnetfeldrichtung quantisiert, entsprechend der Quantenzahl  $m_l$ . Das magnetische Moment  $\vec{\mu}$  der Elektronen zeigt in die entgegengesetzte Richtung von  $\vec{l}$ , wie in Abb. 2.52 verdeutlicht. Der Bahnanteil des magnetischen Moments ist (normaler Zeeman-Effekt):

$$\vec{\mu} = -g\mu_B \frac{1}{\hbar} \vec{l} \quad (2.235)$$

mit  $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m}$  dem Bohr'schen Magneton ergibt sich:

$$\vec{\mu} = -\frac{e}{2m} \vec{l} \quad (2.236)$$

Die potentielle Energie eines magnetischen Moments im Magnetfeld ist:

$$E_{pot} = -\vec{\mu} \vec{B} \quad (2.237)$$

D.h. der Zustand zu  $m_l = -l$  ist der energetisch günstigste Zustand, da das Skalarprodukt aus  $\vec{\mu}$  und  $\vec{B}$  maximal positiv wird. Das magnetische

Moment richtet sich in Richtung Magnetfeld aus. Dies ist das paramagnetische Verhalten und noch *nicht* der diamagnetische Beitrag.

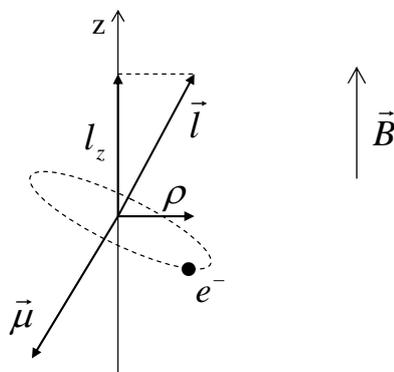


Abbildung 2.52: Larmorfrequenz

Auf dieses magnetische Moment wirkt in einem Magnetfeld zusätzlich ein Drehmoment, das zu einer *Präzession* des magnetischen Moments führt. Die Umlauffrequenz bezeichnet man als **Larmorfrequenz**  $\omega_L$ :

$$\boxed{\omega_L = \frac{eB}{2m}} \quad (2.238)$$

Nur diese Präzessionsbewegung führt zum diamagnetischen Verhalten. Diese Präzessionsbewegung kann im klassischen Sinne als Elektronenbewegung auf einer Kreisbahn mit Radius  $\rho$  aufgefasst werden. Für ein Atom mit  $Z$  Valenzelektronen entspricht das einem Strom  $I$  von

$$I = -Ze \frac{\omega_L}{2\pi} = -\frac{Ze^2 B}{4\pi m} \quad (2.239)$$

Der Beitrag zum magnetischen Moment  $\mu_{\text{Präzession}}$ , der durch diese Präzessionsbewegung bewirkt wird, ergibt sich aus der Strom umflossenen Fläche. Damit erhalten wir:

$$\mu_{\text{Präzession}} = IA = I\rho^2\pi = -\frac{Ze^2 B}{4m}\rho^2 \quad (2.240)$$

wegen  $\langle r^2 \rangle = \langle x^2 \rangle + \langle y^2 \rangle + \langle z^2 \rangle$  und  $\langle \rho^2 \rangle = \langle x^2 \rangle + \langle y^2 \rangle$  ergibt sich:

$$\langle \rho^2 \rangle = \frac{2}{3} \langle r^2 \rangle \quad (2.241)$$

und schließlich das magnetische Moment  $\mu_{\text{Präzession}}$  zu:

$$\mu = -Z \frac{e^2 B}{4m} \frac{2}{3} \langle r^2 \rangle \quad (2.242)$$

Die **Magnetisierung** eines Materials ist die gemittelte Summe aller magnetischen Momente des Festkörpers. Für diesen diamagnetischen Beitrag von  $N$  Atomen ist das:

$$M = \sum_N \vec{\mu}_{\text{Präzession}} = \langle \mu_{\text{Präzession}} \rangle N \quad (2.243)$$

Die magnetische Suszeptibilität  $\chi$  beschreibt das Verhältnis zwischen Magnetisierung und dem außen angelegten Feld  $H$ .

$$\vec{M} = \chi \vec{H} \quad (2.244)$$

Damit wird die magnetische Feldstärke  $\vec{B}$ , die im Inneren des Festkörpers sich aus äußerem Feld  $\vec{H}$  und Magnetisierung  $\vec{M}$  zusammensetzt zu:

$$\vec{B} = \mu_0 (\vec{H} + \vec{M}) \quad (2.245)$$

bzw.

$$\vec{B} = \mu_0 (1 + \chi) \vec{H} = \mu_0 \mu \vec{H} \quad (2.246)$$

mit  $\mu$  der **magnetischen Permeabilität**. Da in unserer Betrachtung das von außen angelegte Feld mit  $\vec{B}$  notiert wurde ( $\vec{B}_{\text{ausßen}} = \mu_0 \vec{H}$ ), ergibt sich schließlich die Suszeptibilität, gemäß Definition 2.244 zu:

$$\chi = -ZN \mu_0 \frac{e^2}{6m} \langle r^2 \rangle \quad (2.247)$$

Dieses diamagnetische Verhalten durch die induzierte Präzessionsbewegung der Elektronen existiert bei allen Festkörpern. Allerdings kann es nur beobachtet werden, wenn der diamagnetische Beitrag gemäß  $\mu_{\text{Präzession}}$  nicht von dem paramagnetischen Beitrag gemäß  $\mu$  überlagert wird. Im Fall von Edelgasatome ist das gewährleistet, da die Elektronen der komplett gefüllten Schalen zu einem Gesamtdrehimpuls und Spin gleich Null koppeln. D.h. auch die

magnetischen Momente  $\mu$  aller Elektronen addieren sich zu Null und nur das induzierte Moment  $\mu_{\text{Prazession}}$  verbleibt.

- **Leitungsbandelektronen**

Bei dem Beitrag freier Elektronen im Leitungsband zur Magnetisierung wird die Betrachtung komplizierter. Zunächst würde man vermuten, dass die Elektronen einen Spin tragen und deshalb sich in einem äußeren Magnetfeld ausrichten und damit zu einem paramagnetischen Verhalten führen. Allerdings werden mit dem Einschalten des Magnetfeldes die Elektronen auf sogenannte Zyklotronbahnen gezwungen, die gemäß der Lenz'schen Regel diamagnetischen Charakter haben. Schließlich gilt die Besetzung der Zustände gemäß dem Pauliverbot was bedeutet, dass eine bestimmte Ausrichtung bezgl. des Magnetischen Feldes vielleicht günstiger wäre, jedoch kann das Teilchen seine Gesamtenergie reduzieren in dem es einen freien Zustand niedrigerer kinetischer Energie besetzt obwohl dessen Spinausrichtung ungünstig bezgl. des Magnetfeldes wäre. Die beiden Beiträge des Spins sowie der Bahnbewegung der Elektronen können sowohl zu einem diamagnetischen als auch zu einem paramagnetischen Verhalten der Elektronen führen:

- *Spins*: Die Ausrichtung der Spins bzw. der magnetischen Momente der Elektronen erzeugt einen paramagnetischen Beitrag, die so genannte Pauli-Spin-Suszeptibilität  $\chi_{\text{Pauli}}$ . Diese wird weiter unten im Abschnitt zum Paramagnetismus erläutert.
- *Bahnbewegung*: Die Bahnbewegung der Elektronen ist eine Zyklotronbahn mit einer Frequenz  $\omega_c = \frac{eB}{m^*}$  mit  $m^*$  der effektiven Masse. Diese Bahnbewegung hat einen diamagnetischen Charakter, man spricht von Landau-Diamagnetismus. Auch erfolgt eine Besetzung der Niveaus gemäß der Fermi-Dirac-Statistik und man bekommt eine Suszeptibilität  $\chi_{\text{Landau}}$ , die proportional zur Pauli-Spin-Suszeptibilität ist. Der Zusammenhang ist:

$$\chi_{\text{Landau}} = - \left( \frac{m}{m^*} \right)^2 \frac{1}{3} \chi_{\text{Pauli}} \quad (2.248)$$

Diese Suszeptibilität hängt zudem von dem Verhältnis der Elektronenmasse zur effektiven Elektronenmasse ab. Dies lässt sich leicht verstehen: bei der Pauli-Suszeptibilität wird die Magnetisierung durch die Spins erzeugt, dessen magnetisches Moment direkt vom Bohrschen Magneton und damit der normalen Elektronenmasse abhängt; bei dem Landau-Diamagnetismus betrachten wir die

Bewegung eines Elektrons auf einer Kreisbahn im Ortsraum, die von der Trägheit des Elektrons gegeben durch seine *effektive* Masse geprägt ist.

Zusammenfassend bekommt man eine Suszeptibilität eines Metalls von:

$$\chi_{\text{Metall}} = \chi_{\text{Pauli}} \left[ 1 - \left( \frac{m}{m^*} \right)^2 \frac{1}{3} \right] \quad (2.249)$$

d.h. für Metall mit Elektronen einer kleinen effektiven Masse beobachtet man diamagnetisches Verhalten. Für Metalle mit einer Elektronenmasse ähnlich zu der von freien Elektronen paramagnetisches Verhalten. So ist zum Beispiel Platin ein Paramagnet während Kupfer und Silber Diamagneten sind. Ein extremes Beispiel ist hierbei Wismut, das ein sehr guter Diamagnet ist.

Betrachten wir an dieser Stelle aber zunächst den **Landau-Diamagnetismus**. Löst man die Bewegungsgleichung eines freien Elektrons in einem Magnetfeld, so erhält man eine Kreisbahn senkrecht zur Magnetfeldrichtung. Diese Bahn wird von dem Elektron mit der **Zyklotronfrequenz**  $\omega_c$  umlaufen<sup>6</sup>(siehe Abb. 2.53):

$$\boxed{\omega_c = \frac{eB}{m}} \quad (2.250)$$

Der Radius dieser Bahn ist abhängig von der Geschwindigkeit, mit der die Elektronen die Bahn umlaufen:

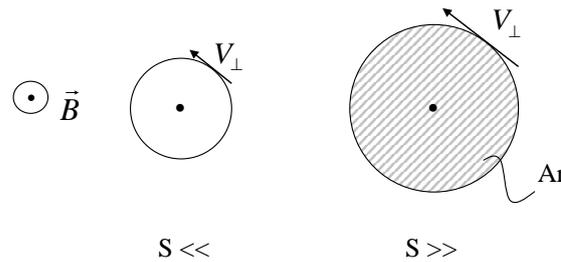
$$r = \frac{v_{\perp}}{\omega_c} \quad (2.251)$$

Bei genügend tiefen Temperaturen stoßen die Elektronen nur wenig. Damit befindet sich das Elektron auf dieser Kreisbahn in einem einzigen quantenmechanischen Zustand. Nachdem die Wellenfunktion eindeutig ist, muß die Phase der Wellenfunktion bei einem Umlauf periodische Randbedingungen erfüllen. Diese periodische Randbedingung bedingt automatisch, daß auch der magnetische Fluß, der durch diese Elektronenbahn tritt, quantisiert sein muß. Der magnetische Fluß  $\Phi_s$  durch

<sup>6</sup>Die Larmorfrequenz ist genau 1/2 mal der Zyklotronfrequenz. Bei der Larmorfrequenz wird die *Präzession* des magnetischen Moments, während bei der Zyklotronfrequenz direkt die Bewegung des Elektron beschrieben wird.

eine freie Elektronenbahn, die eine Fläche  $A_r$  einschließt, muß ein Vielfaches ( $s$ ) von  $h/e$  sein<sup>7</sup> :

$$\Phi_s = \frac{h}{e}s = BA_r \quad s \in N \quad (2.252)$$



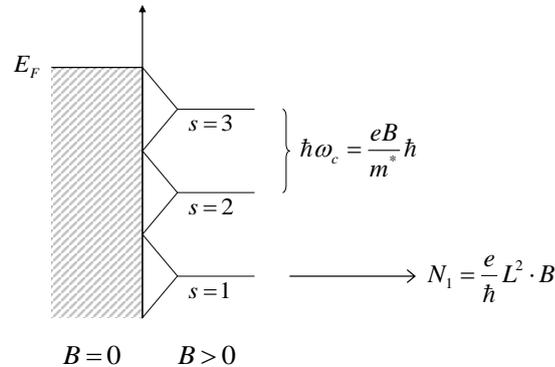
**Abbildung 2.53:** Mit steigender Geschwindigkeit  $v_{\perp}$  des Elektrons steigt der Radius der Kreisbahn im Magnetfeld.

Da  $A_r$  nur diskrete Werte annehmen kann, ist auch der Radius  $r$  ( $A_r = r^2\pi$ ) der Elektronenbahn diskretisiert. Nachdem dieser Radius von der Geschwindigkeit  $v_{\perp}$  senkrecht zur Richtung des Magnetfeldes abhängt, sind nur noch bestimmte Geschwindigkeiten  $v_{\perp}$  erlaubt. Damit zerfällt die kontinuierliche Zustandsdichte bis zum Fermi-niveau für  $B = 0$  in diskrete Niveaus für  $B > 0$ . Jedes Niveau umschließt jeweils mit steigendem  $v_{\perp}$  eine zunehmende Zahl von Flußquanten. Die Niveaus bezeichnet man als **Landau-Niveaus**, wie in Abb. 2.54 dargestellt ist. Der energetische Abstand dieser Niveaus ist jeweils  $\hbar\omega_c$ .

Wie groß ist jetzt die Besetzung eines einzelnen Landau-Niveaus? Wegen der Vorzugsrichtung des Magnetfeldes muß die Quantisierungsbedingung nur für eine Ebene senkrecht zu  $\vec{B}$  betrachtet werden. D.h. zur Ableitung der Zustandsdichte betrachten wir ein zweidimensionales Problem. Wie groß ist das Volumen, das eine Elektronenbahn mit  $v_{\perp}$  im Phasenraum einnimmt? Dazu müssen wir eine zu  $A_r$  entsprechende Fläche  $A_k$  im  $k$ -Raum ermitteln. Die Kraft auf ein Teilchen im Magnetfeld ist die Lorentzkraft. Mit dem Impuls  $\hbar k$  bekommt man:

$$\hbar \frac{d}{dt} k = e \vec{v}_{\perp} \times \vec{B} = e \frac{d\vec{r}}{dt} \times \vec{B} \quad (2.253)$$

<sup>7</sup>Hier ist die Ladung  $q = e$ , da nur ein einzelnes Leitungselektron betrachtet wurde und kein Cooperpaar, wie bei der Supraleitung.



**Abbildung 2.54:** Bei einem Festkörper im Magnetfeld verteilen sich die elektronischen Zustände auf einzelnen Landau-Niveaus. Der magnetische Fluß durch die Kreisbahn der Elektronen ist jeweils  $s$  mal ein Flußquant.

damit wird eine Änderung  $\Delta r$  im Ortsraum mit einer Impulsänderung  $\Delta k$  im  $k$ -Raum verknüpft via:

$$\Delta k = \frac{e}{\hbar} B \Delta r \quad (2.254)$$

bzw. die Flächen  $A_r$  und  $A_k$  verknüpfen sich wie:

$$A_k = \left( \frac{e}{\hbar} B \right)^2 A_r \quad (2.255)$$

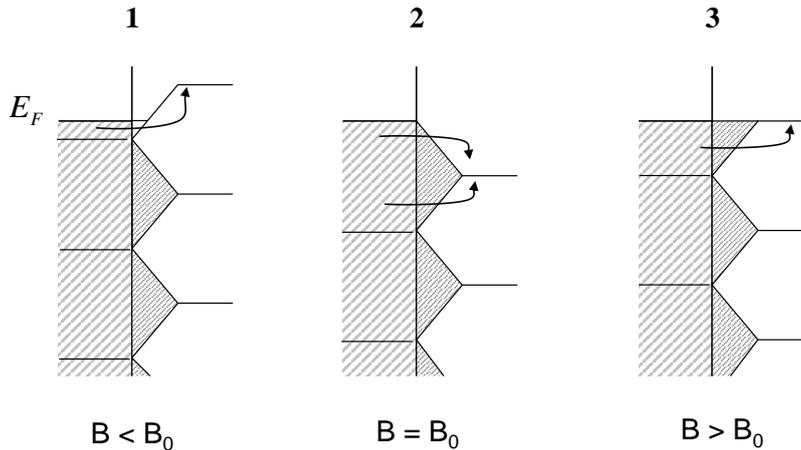
Die gesamte Fläche im Phasenraum, die von den Zuständen bis zu einer Quantenzahl  $s$  eingenommen wird, ist demnach mit Gl. 2.252:

$$A_k = \frac{2\pi}{\hbar} e B s \quad (2.256)$$

Die Zahl der Elektronen, die ein einzelnes Landau-Niveau besetzen, ist das Verhältnis der Fläche im  $k$ -Raum, die bei einer Änderung von  $s$  auf  $s + 1$  hinzu kommt, zur Fläche, die eine einzelne Mode einnimmt<sup>8</sup>. Somit ist die Zahl  $N$  der Elektronen, die Landau-Niveaus bis zu einer Quantenzahl  $s$  besetzen in einem zweidimensionalen System der Ausdehnung  $L$ :

<sup>8</sup>Die Fläche einer Mode im zweidimensionalen auf einem Ring ist  $\left(\frac{2\pi}{L}\right)^2$

$$N = \frac{2\pi}{\hbar} eBs \frac{1}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^2} \quad (2.257)$$



**Abbildung 2.55:** Änderung der Besetzung der Landau-Niveaus mit zunehmender Magnetfeldstärke.

Mit einer Erhöhung der Magnetfeldstärke erhöht sich der Abstand der Landau-Niveaus. Alle Elektronen, die im Falle ohne Magnetfeld die Zustände bis zur Fermienergie gleichmäßig besetzen, müssen sich jetzt auf die Landau-Niveaus verteilen, wie in Abb. 2.55 veranschaulicht. Dies ist möglich, da sich der Abstand der Landau-Niveaus mit steigendem  $B$  vergrößert, sich aber auch gleichzeitig die Besetzung eines einzelnen Niveaus nach Gl. 2.257 mit  $B$  erhöht.

Wie ändert sich jetzt die Magnetisierung des Materials mit Variation des Magnetfeldes. Hierzu betrachten wir Abb. 2.55. Durch die gleiche Anzahl der möglichen Zustände in jeden Landau-Niveaus ist es möglich die Verteilung mit und ohne Magnetfeld sehr schematisch zu betrachten. Dazu verteilt man die Zustände bis zur Fermikante in die Niveaus durch wobei sich die Energien entsprechend erhöhen und erniedrigen. In 2 in Abb. 2.55 erkennt man, dass ein Magnetfeld gewählt wurde bei der diese Aufteilung in die Landau-Niveaus exakt komplett möglich ist. Da sich dabei durch die Erhöhung bzw. Erniedrigung der Energie die Gesamtenergie des Systems nicht ändert, ergibt sich auch *kein* magnetisches Verhalten durch die Bahnbewegung. Erniedrigt man

das Magnetfeld, rutschen die Landau-Niveaus enger zusammen und ein kleiner Teil der Zustände, muss in ein Landau-Niveau gehoben werden, das höher als die Fermi-Energie liegt (1 in Abb. 2.55). Somit erhöht sich die Gesamtenergie des Systems bei Anlegen eines Magnetfeldes. Dies entspricht einem magnetischen Moment, das entgegen der Richtung des äußeren Magnetfeldes ist, d.h. das Material wird diamagnetisch. Der Maximalwert für das diamagnetische Verhalten wird erreicht, wenn ein Landau-Niveau genau auf der Höhe der Fermienergie liegt für ein eingeschaltetes Magnetfeld. Man erkennt an dieser Abfolge, dass mit Variation des Magnetfeldes die Magnetisierung oszilliert. Dies bezeichnet man als **Haas-van Alphen-Effekt**. Dieser Effekt ist besonders dominant bei großen Magnetfeldern und niedrigen Temperaturen. Man erkennt auch, dass für die Magnetisierung im Wesentlichen die Zustandsdichte an der Fermikante wichtig wird. In einem Metall entspricht die Fermienergie einer Oberfläche im Impulsraum, den sogenannten *Fermiflächen*. Für freie Teilchen ist dies einfach eine Kugel mit einem Radius  $k_F$ . Unter der Berücksichtigung der Bandstruktur von freien Leitungselektronen ist diese Fermikugel aber insbesondere in der Nähe der Brillouinzonengrenze modifiziert (siehe Kapitel zur Bandstrukturechnung). Der Landau-Diamagnetismus entspricht dann einer Bewegung der Elektronen auf Bahnen die entstehen durch das Schneiden einer Ebene senkrecht zur Magnetfeldrichtung und der Fermifläche. Die Umlauffrequenz ist dann ein Maß für die Form dieser Bahn. Somit kann man durch die Analyse der Oszillationen die Fermiflächen von Metallen vermessen.

Diese Oszillation haben eine Periode gemäß  $1/B$ , da mit einer Variation von  $1/B$  sich die Magnetisierung ändert. Betrachten wir dazu noch einmal die Verknüpfung zwischen der Fläche im Impulsraum bei einem gegebenen Index des Landau-Niveaus von  $s$ :

$$A_k(s) = \frac{2\pi}{\hbar} e B_s s \quad (2.258)$$

Wie muss sich jetzt das Magnetfeld ändern, damit bei einem Wert von  $s + 1$  wieder die gleiche Fläche im Impulsraum herauskommt und damit das gleiche magnetische Verhalten. Wir haben:

$$A_k(s + 1) = \frac{2\pi}{\hbar} e B_{s+1} (s + 1) \quad (2.259)$$

Aus der Forderung  $A_k(s + 1) = A_k(s)$  bekommen wir:

$$s \left( \frac{1}{B_{s+1}} - \frac{1}{B_s} \right) = \frac{2\pi e}{\hbar} \quad (2.260)$$

D.h. solange man mit einer Änderung von  $s$  auch das Magnetfeld proportional zu  $1/B$  ändert bekommt man dasselbe Verhalten. Analog, kann man diese Periodizität auch mit den Radien der Gyrationenbahnen und damit der Quantisierungsbedingung motivieren, sich proportional zu  $1/B$  ändern, wegen

$$r = \frac{v_{\perp}}{\omega_c} = \frac{v_{\perp} m}{eB}. \quad (2.261)$$

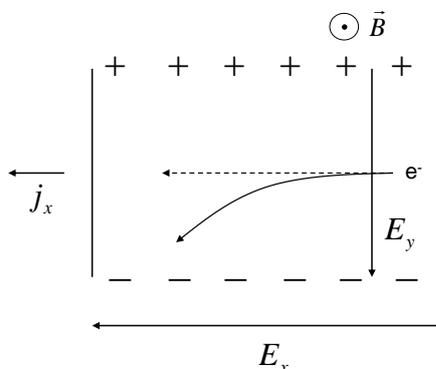
Die Beschreibung der Leitungsbandelektronen in einem starken Magnetfeld erklärt auch den **Quanten-Halleffekt**. Betrachten wir dazu ein räumlich eingeschränktes zweidimensionales Elektronengas. In x-Richtung sei ein elektrisches Feld  $E_x$  angelegt, das einen Strom  $j_x$  antreibt. Die Driftgeschwindigkeit der Elektronen sei  $v_D$ . Senkrecht zu dieser Ebene sei ein Magnetfeld  $B$  in z-Richtung angelegt. Beim klassischen Halleffekt wie in Abb. 2.56 verdeutlicht, werden die Elektronen durch die Lorentzkraft abgelenkt und bauen ein elektrisches Querfeld  $E_y$  auf. Im Gleichgewicht heben sich die Lorentzkraft und die elektrostatische Kraft in y-Richtung auf. Man bekommt:

$$e \left( v_D \times \vec{B}_z \right) = eE_y \quad (2.262)$$

bzw.

$$v_D = \frac{E_y}{B_z} \quad (2.263)$$

Die Elektronenbewegung in einem statischen elektrischen und magnetischen Feld erfolgt in Richtung  $\vec{E} \times \vec{B}$ . Damit kann Stromtransport in x-Richtung *nur* stattfinden, wenn die Elektronen Stöße erleiden und dadurch in x-Richtung driften können (siehe Abb. 2.56). Diese Stoßprozesse können nur stattfinden, wenn unbesetzte Zustände für die Elektronenbewegung existieren (ähnlich zur Diskussion der Unterschiedes Isolator/Metall). Ist zum Beispiel das oberste Landau-Niveau komplett gefüllt, so kann kein Strom in x-Richtung fließen und die Leitfähigkeit  $\sigma_{xx}$  (Feld in x-Richtung, Strom in x-Richtung) ist Null. D.h. mit einer Variation der Magnetfeldstärke füllt und entleert sich das oberste Landau-Niveau und dem entsprechend oszilliert die elektrische Leitfähigkeit  $\sigma_{xx}$ , wie in Abb. 2.57 veranschaulicht.



**Abbildung 2.56:** Beim klassischen Halleffekt kompensieren sich die Lorentzkraft und die elektrostatische Kraft im Querfeld  $E_y$ .

Was passiert aber mit der Querleitfähigkeit  $\sigma_{xy}$  (Strom in x-Richtung, Feld in y-Richtung). Der Strom in x-Richtung ist Driftgeschwindigkeit mal Dichte der Elektronen:<sup>9</sup>

$$j_x = \frac{N}{L^2} e \frac{E_y}{B_z} \quad (2.264)$$

Mit der Zahl der Elektronen in *vollständig* gefüllten Landau-Niveaus ist nach Gl. 2.257:

$$j_x = \frac{e^2}{h} s E_y \quad (2.265)$$

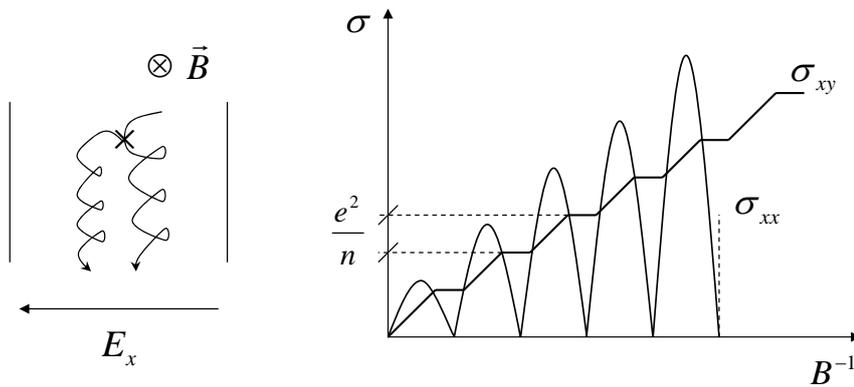
damit wird die Querleitfähigkeit  $\sigma_{xy}$  zu:

$$\sigma_{xy} = \frac{e^2}{h} s \quad (2.266)$$

Dies ist eine quantisierte Leitfähigkeit, die allerdings nur dann beobachtbar wäre, wenn *nur* komplett gefüllte Landau-Niveaus am Stromtransport beitragen dürfen. Dies ist bei realen Proben der Fall: durch Verunreinigungen in dem Material existieren elektronische Zustände auch *zwischen* den Landau-Niveaus, die besetzt werden können, allerdings nicht zum Stromtransport beitragen. Mit abnehmender Feldstärke  $B$  schieben sich die Landau-Niveaus zusammen. Nachdem ein Niveau sich vollständig gefüllt hat, muß bei einer weiteren Erniedrigung der Magnetfeldstärke das nächst höher liegende Landau-Niveau besetzt werden. In realen Proben werden allerdings zunächst

<sup>9</sup>Hier notiert man eine Stromdichte im zweidimensionalen in Einheiten  $Ccm^{-1}$ .

lokalisierte Zustände dazwischen besetzt. Demzufolge bleibt die Zahl derjenigen Elektronen in den Landau-Niveaus, die auch zur Leitfähigkeit beitragen können, zunächst konstant. Dies führt zu Plateaus in der Querleitfähigkeit  $\sigma_{xy}$ , die bei Vielfachen von  $\frac{e^2}{h} \sim 1/25\Omega$  liegen. Die Plateaus liegen genau in den Bereichen der Magnetfeldstärke bei denen die Landau-Niveaus nahezu vollständig gefüllt sind, und  $\sigma_{xx}$  jeweils Null wird. Dies ist der **Quanten-Halleffekt**.



**Abbildung 2.57:** Beim Quanten-Halleffekt entstehen Plateaus in der Querleitfähigkeit  $\sigma_{xy}$ , die bei ganzzahligen Vielfachen von  $e^2/h$  liegen.

## 2.8.2 Paramagnetismus

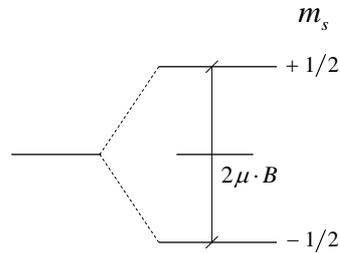
Beim Paramagnetismus verstärkt die Ausrichtung des magnetischen Momentes der Elektronen in Richtung des Magnetfeldes das interne Magnetfeld. Paramagnetismus beobachtet man damit für Festkörper, bei denen der Gesamtdrehimpuls bzw. Gesamtspin von Null verschieden ist. In der Regel ist der Paramagnetismus wesentlich stärker als der Diamagnetismus.

### paramagnetischer Beitrag Valenzelektronen

Das magnetische Moment eines Mehrelektronensystems mit Gesamtdrehimpuls  $\vec{J}$  ist:

$$\vec{\mu} = -g_j \mu_B \frac{1}{\hbar} \vec{J} \quad (2.267)$$

mit  $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ . Die potentielle Energie ist:



**Abbildung 2.58:** Aufspaltung eines 2-Niveau-Systems im Magnetfeld

$$E_{pot} = -\vec{\mu}\vec{B} = -m_j g_j \mu_B \vec{B} \quad (2.268)$$

mit dem Bohr'schen Magneton  $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m}$ . In dem N-Teilchensystem Festkörper seien die Niveaus gemäß Boltzmann-Statistik besetzt. Die Zahl der Elektronen  $N_1$  mit paralleler Ausrichtung des magnetischen Moments  $\vec{\mu}$  zum Magnetfeld  $\vec{B}$  ist:

$$\frac{N_1}{N} = \frac{e^{\frac{\mu B}{k_B T}}}{e^{\frac{\mu B}{k_B T}} + e^{-\frac{\mu B}{k_B T}}} \quad (2.269)$$

Die Zahl der Elektronen  $N_2$  mit anti-paralleler Ausrichtung des magnetischen Moments  $\vec{\mu}$  zum Magnetfeld  $\vec{B}$  ist:

$$\frac{N_2}{N} = \frac{e^{-\frac{\mu B}{k_B T}}}{e^{\frac{\mu B}{k_B T}} + e^{-\frac{\mu B}{k_B T}}} \quad (2.270)$$

Die Magnetisierung  $M$  des Materials ist demnach:

$$M = (N_1 - N_2) \mu = N \mu \tanh\left(\frac{\mu B}{k_B T}\right) \quad (2.271)$$

Für  $\mu B \ll k_B T$  läßt sich Gl. 2.271 annähern zu:

$$M = N \mu \frac{\mu B}{k_B T} \quad (2.272)$$

Damit erhält man die paramagnetische Suszeptibilität  $\chi$  zu:

$$\chi = \frac{C}{T} \quad (2.273)$$

Dies bezeichnet man als **Curie-Gesetz**. Die Suszeptibilität steigt stark mit sinkender Temperatur an, da dann eine Ungleich-Besetzung in dem 2-Niveau-System auftritt.

### adiabatische Entmagnetisierung

Das paramagnetische Verhalten eines Materials wurde zum Abkühlen eines Festkörpers bis zu mK ausgenutzt. Betrachten wir dazu zunächst die Entropie eines Systems aus  $N$  Elektronen mit  $S$  Spineinstellungen. Falls das Magnetfeld sehr klein ist, sind alle möglichen Spineinstellungen gleichwertig und die Entropie berechnet sich aus der Zahl der möglichen Einstellungen zu:

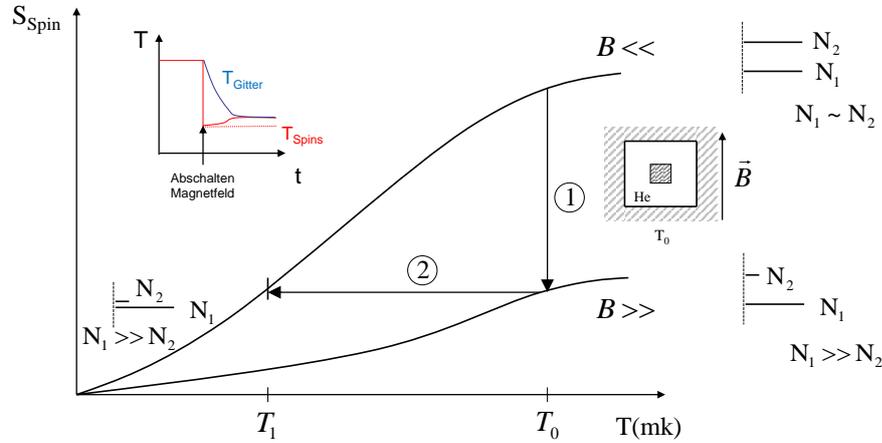
$$S_{Spin} = k_B \ln (2S + 1)^N \quad (2.274)$$

Erhöht man jetzt das Magnetfeld, werden nur die energetisch niedriger liegenden Zustände besetzt und die Zahl der Möglichkeiten reduziert sich. Die Entropie sinkt. Bei dem Abkühlen durch **adiabatische Entmagnetisierung** bringt man zunächst einen paramagnetischen Festkörper in ein Temperaturbad aus gasförmigem Helium. Dieses Helium stellt einen thermischen Kurzschluss zu einer gekühlten Fläche dar (1 K). Danach wird das Magnetfeld erhöht und die Spins richten sich aus. Bei dieser isothermen Zustandsänderung sinkt die Entropie des Spinsystems. Anschließend wird das Heliumgas abgepumpt und der Festkörper thermisch isoliert. Schaltet man jetzt das Magnetfeld ab, so beginnen die Spins sich wieder zufällig auszurichten, ihre Entropie steigt. Nachdem diese Zustandsänderung aber isentrop bzw. adiabatisch erfolgt (ohne Zufuhr von Wärme) muß die Entropieerhöhung des Spinsystems automatisch zu einer Entropieerniedrigung der Gitterschwingungen führen. D.h. der Festkörper kühlt sich ab. Diese Art der Kühlung ist ein einmaliger Prozeß. Man erreicht damit Temperaturen bis mK.

### paramagnetischer Spin-Beitrag der Leitungsbandelektronen

Die Beschreibung des magnetischen Beitrags durch die Gyration der Elektronen in einem freien Elektronengas hatten wir mit Hilfe der Landau-Niveaus abgeleitet. Allerdings hat auch der Elektronenspin einen Anteil an der Magnetisierung.

Die potentielle Energie von freien Elektronen mit einem magnetischen Spin-Moment parallel zur Magnetfeldrichtung wird um  $\mu B$  erniedrigt, während die mit anti-parallelem Spin-Moment um  $\mu B$  erhöht wird. Betrachtet man den Fall  $T=0$ , so würde bei einem endlichen Magnetfeld eine maxi-



**Abbildung 2.59:** Adiabatische Entmagnetisierung: mit der Ankopplung an ein Heliumbad wird die Temperatur  $T_0$  in Schritt 1 konstant gehalten. Die Besetzung ändert sich mit Erhöhen des Magnetfeldes zu  $N_1 > N_2$ . Danach wird das Heliumbad entkoppelt und das Magnetfeld in Schritt 2 erniedrigt. Bei diesem isentropen Schritt sinkt die Temperatur des Spinsystems auf  $T_1$ . Danach erhöht sich die Unordnung im Spinsystem, wobei dem Gitter die dafür notwendige Wärme entzogen wird. Nicht nur das Spinsystem sondern insgesamt der Festkörper kühlt sich ab (Insert).

male Magnetisierung vorliegen, da alle Spins sich in die energetisch günstigste Richtung orientieren. Dies gilt allerdings nur für die Valenzelektronen. Bei freien Elektronen wird der Fermi-See vollständig gefüllt, und wegen dem Pauli-Verbot können nicht alle freien Elektronen ihren Spin günstig zur Magnetfeldrichtung ausrichten. Nur ein Anteil  $T/T_F$  an der Fermikante findet bei einer Änderung des Magnetfeldes unbesetzte Zustände. Nachdem alle Zustände bis zur Fermienergie gefüllt sind, erkennt man an Abb. 2.60, daß eine parallele Magnetisierung verbleibt. Ähnlich wie bei der Betrachtung der spezifischen Wärmekapazität eines freien Elektronengases, trägt nur ein Anteil proportional zu  $T/T_F$  zur Suszeptibilität bei.

$$M = N \frac{\mu^2 B}{k_B T} \frac{T}{T_F} \quad (2.275)$$

Man erkennt, daß die Magnetisierung in diesem Fall temperaturunabhängig wird. Dies läßt sich genauer ableiten. Die Zahl der Elektronen  $N_+$  mit parallelem Spin ist:

$$N_+ = \frac{1}{2} \int_{-\mu B}^{E_F} f(E)g(E + \mu B)dE \simeq \frac{1}{2} \int_0^{E_F} f(E)g(E)dE + \frac{1}{2}\mu Bg(E_F) \quad (2.276)$$

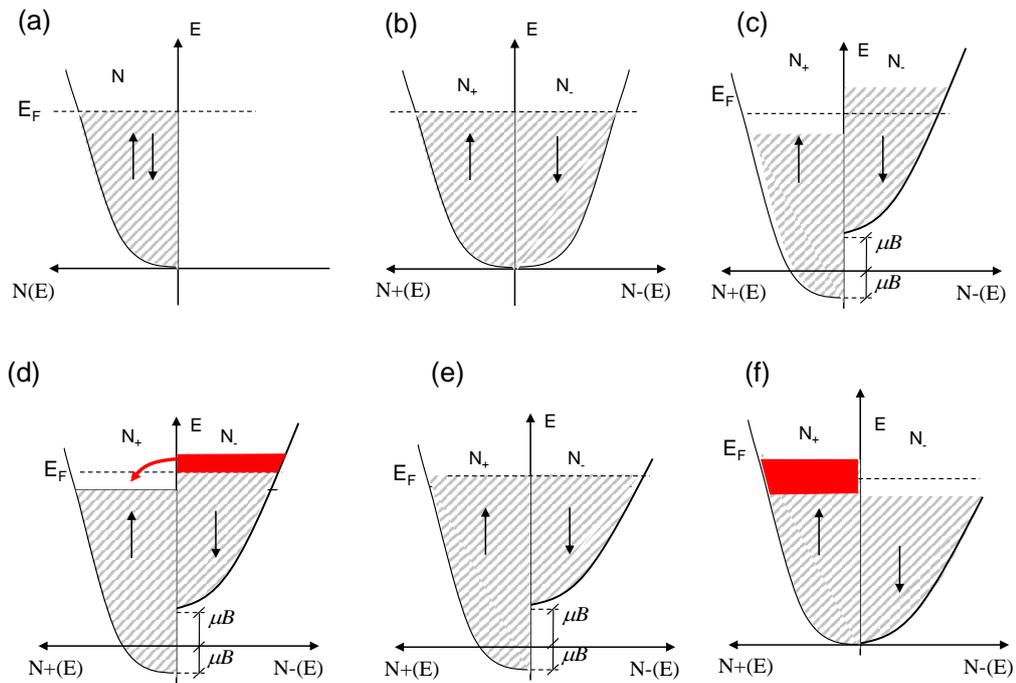
Die mit anti-parallelem Spin ist:

$$N_- = \frac{1}{2} \int_{\mu B}^{E_F} f(E)g(E - \mu B)dE \simeq \frac{1}{2} \int_0^{E_F} f(E)g(E)dE - \frac{1}{2}\mu Bg(E_F) \quad (2.277)$$

Die Magnetisierung ergibt wieder

$$M = \mu(N_+ - N_-) = \mu^2g(E_F)B = \frac{3N\mu^2}{2k_B T_F}B \quad (2.278)$$

Dieser Anteil an der Magnetisierung bezeichnet man als Pauli'scher Spin-Paramagnetismus.



**Abbildung 2.60:** Paramagnetismus des freien Elektronengases: (a) Zustandsdichte des freien Elektronengases für  $N$  Elektronen. (b) Aufteilung der Zustandsdichte in die beiden Spinorientierungen von  $\mu$  parallel zum Magnetfeld  $N_+$  und antiparallel  $N_-$ . (c) Energieverschiebung  $\mu B$  durch Anlegen eines Magnetfeldes  $B$ . (d) Durch Umdrehen der Spinorientierung eines Teils der antiparallelen Spins (rote Markierung) kann das System seine Energie erniedrigen. (e) es entsteht ein eindeutiges Fermi-niveau. (f) Verschieben, der beiden Spinorientierungen willkürlich auf der Energieachse zu einem gemeinsamen Ursprung. Der rot schraffierte Teil an der Fermikante ist der zusätzliche Anteil an Spins in Richtung des Magnetfeldes, der paramagnetische Anteil der Leitungselektronen. Die grauen Flächen der beiden Spinrichtungen sind gleich und tragen nicht zur Magnetisierung bei.

### 2.8.3 Ferromagnetismus

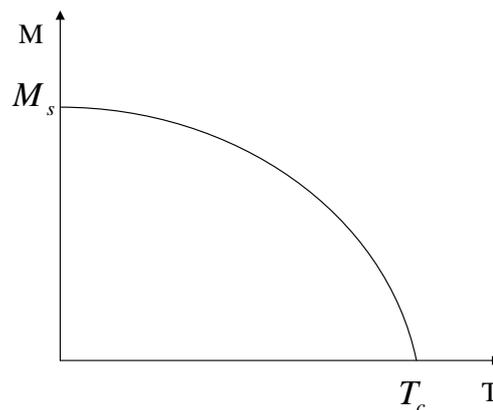
Beim Ferromagnetismus wird die Kopplung der magnetischen Momente untereinander wesentlich. Dies läßt sich veranschaulichen, da ein *internes* Magnetfeld durch die herrschende Magnetisierung erzeugt wird. Dieses ist so stark, daß sich die magnetischen Momente der Elektronen in diesem internen Feld ausrichten. Dieses interne Feld bezeichnet man als **Austauschfeld**  $B_E$ .

$$B_E = \lambda M \quad (2.279)$$

Dieses interne Magnetfeld läßt sich in Gl. 2.271 einsetzen und man erhält:

$$M = N\mu \tanh\left(\frac{\mu\lambda M}{k_B T}\right) \quad (2.280)$$

Diese Gleichung ergibt einen Zusammenhang zwischen Temperatur und Magnetisierung, wie er in Abb. 2.61 dargestellt ist.



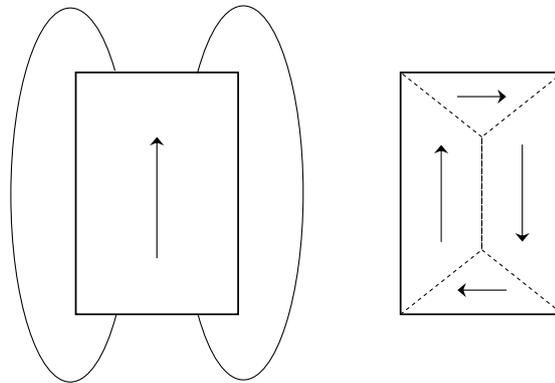
**Abbildung 2.61:** Magnetisierungskurve eines Ferromagneten

Erst unterhalb einer kritischen Temperatur  $T_c$ , der **Curie-Temperatur**, wird die Kopplungsenergie der einzelnen magnetischen Momente untereinander stärker als die thermische Anregung. Damit tritt spontan eine lokale Ordnung ein und die Spins orientieren sich parallel zueinander. Die Magnetisierung steigt sprunghaft an. Oberhalb der Curie-Temperatur ist das Verhalten paramagnetisch. Für die Suszeptibilität gilt das **Curie-Weiss-Gesetz**:

$$\chi = \frac{c}{(T - T_c)} \quad (2.281)$$

mit einer Polstelle bei  $T = T_c$ .

Besonderes Merkmal von ferromagnetischen Materialien ist die Bildung von **Domänen** in einem Festkörper. Die parallele Anordnung der einzelnen Spins untereinander gilt nur für bestimmte Bereiche, die Domänen. Diese Domänen sind durch Wände, die **Bloch-Wände**, getrennt. Für die Aufteilung des Festkörpers in einzelne Domänen gibt es ein Optimum. Bei einer einzigen Domäne ergibt sich im Aussenraum des Festkörpers ein magnetisches Feld mit entsprechender Feldenergie. Falls die Domänen sich wie in Abb. 2.62 untereinander anordnen, können die Feldlinien im inneren des Festkörpers geschlossen werden, und die magnetische Feldenergie im Aussenraum wird minimiert. Allerdings müssen Bloch-Wände in dem Festkörper aufgebaut werden, die energetisch ungünstig sind.



**Abbildung 2.62:** Magnetische Domänen

Bei einem Ferromagneten in einem äußeren Magnetfeld ändert sich die Magnetisierung durch ein Verschieben der Bloch-Wände. Bei kleinen Änderungen des Magnetfeldes ist diese Verschiebung reversibel. Für größere Änderungen allerdings wird diese Verschiebung irreversibel, da Defekte in den Kristallen beim Verschieben der Wände überwunden werden. Erhöht man das äußere Magnetfeld, baut sich eine zusätzliche Magnetisierung auf. Durch die irreversiblen Änderungen der Domänenstruktur verbleibt eine Magnetisierung auch nach einem anschließenden Erniedrigen des Magnetfeldes. Eine **Hysterese** entsteht. Materialien, in denen es leicht ist, Bloch-Wände zu verschieben, bezeichnet man als **weich magnetisch**, die Magnete eignen sich als Joch eines Transformators. Materialien, in denen es schwer ist, Bloch-Wände zu verschieben, bezeichnet man als **hart magnetisch**. Diese eignen sich als Permanent-Magnete.

# Kapitel 3

## Kernphysik

Die Kernphysik nahm ihren Anfang mit den Experimenten von Rutherford, der schon in den ersten Experimenten auf eine endliche Ausdehnung des Atomkerns schloss. Die Beobachtung der Struktur der Atomkerne selbst erfolgt mit Projektilen, deren deBroglie Wellenlänge zumindest kleiner als der Kerndurchmesser ist. Deshalb war ein Fortschritt in der Kernphysik immer auch damit verbunden, schnellere Projektil-Strahlen zu erzeugen mit entsprechend kurzer Wellenlänge.

### 3.1 Aufbau Atomkerne

Betrachten wir zunächst den Aufbau der Atome hinsichtlich Masse- und Ladungsverteilung, Spin und magnetische Momente.

#### 3.1.1 Größe Atomkern

Die Größe eines Atomkerns läßt sich auf zwei Arten definieren, nach der Verteilung der Masse und nach der Verteilung der Ladung innerhalb des Atomkerns. Diese Verteilungen werden durch Streuexperimente bestimmt, wobei die Art der Wechselwirkung festlegt, ob die Ladungs- (geladene Teilchen als Streuteilchen) oder die Masse-Verteilung (Neutronen als Streuteilchen) bestimmt wird.

Eine endliche Größe des Atomkerns wurde zuerst bei den Streuexperimenten von Rutherford beobachtet. Der differentielle Wirkungsquerschnitt für Streuung zwischen zwei Punktladungen ist:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left( \frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{4E_0} \right)^2 \frac{1}{\sin^4 \vartheta/2} \quad (3.1)$$

Diese Streuformel konnte die Streuung von Heliumkernen an Goldfolien sehr gut wieder geben. Bei kleinem Stoßparameter bzw. großen Streuwinkeln ist die Annäherung Projektil - Atomkern besonders groß. Bei genügend hoher Energie kann das Projektil teilweise in den Atomkern eindringen und eine Abweichung von der ursprünglichen Annahme zweier Punktladungen wird sichtbar. Die gute Übereinstimmung der Rutherford'schen Streuformel bei kleinen Streuwinkeln war der Nachweis, daß die positive Ladung eines Atoms im Kern lokalisiert ist. Die Abweichung der Streuung von der Rutherford'schen Streuformel bei großen Streuwinkeln ist ein Indiz für eine endliche Ausdehnung des Atomkerns, wie in Abb. 3.1 verdeutlicht wird.

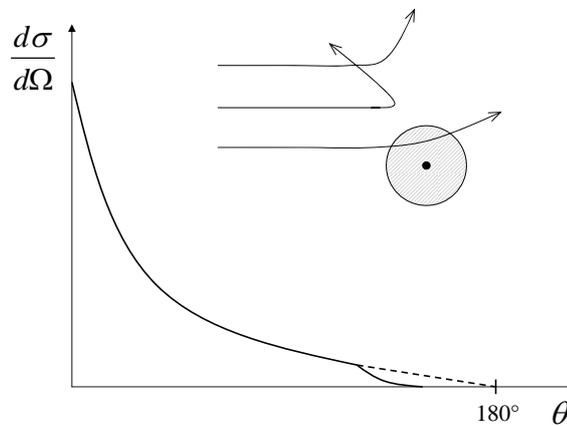


Abbildung 3.1: Rutherfordstreuung.

### Massenverteilung

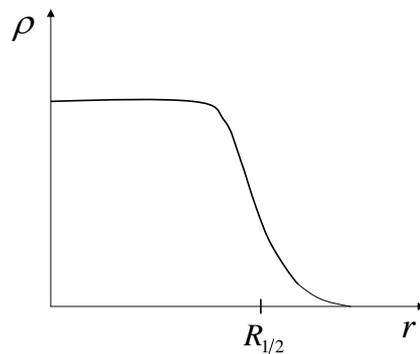
Atomkerne sind aus positiven Protonen und neutralen Neutronen aufgebaut, wie weiter unten motiviert wird. Bei Streuexperimenten, die Protonen verwenden, ist wegen der Coloumb-Wechselwirkung die Ladungs-Verteilung maßgeblich, und bei Experimenten, die Neutronen verwenden, ist allein die Masse-Verteilung maßgeblich.

Mit Neutronen als Streuteilchen läßt die Dichteverteilung im Atomkern bestimmen. Dabei stellt sich heraus, dass diese Dichte sehr *homogen* über den Atomkern verteilt ist. Diese Dichteverteilung hat die Form der Fermi-Dirac-Verteilung:

$$\rho(r) = \rho_0 \frac{1}{e^{\frac{r-R_1/2}{a}} + 1} \quad (3.2)$$

mit  $R_{1/2}$  dem mittleren Radius und  $a$  der Dicke der Kugeloberfläche. Dies ist in Abb. 3.2 verdeutlicht. Die Ausdehnung ist von der Größenordnung  $fm$  und skaliert mit der Massenzahl des Atoms  $A$  wie:

$$R_k = r_0 \sqrt[3]{A} \quad r_0 = 1.3\text{fm} \quad (3.3)$$



**Abbildung 3.2:** Massenverteilung im Atomkern.

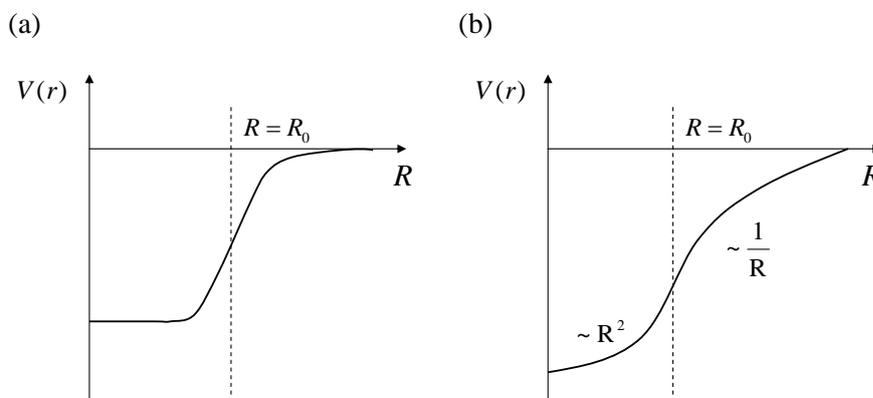
Diese Skalierung ist bemerkenswert, da das Volumen des Atomkerns sich aus der Summe der Volumina der einzelnen Nukleonen ergibt. Dies ist nicht selbstverständlich, da man ja annehmen könnte, daß Kerne mit großer Nukleonenzahlen in der Summe eine stärker Bindung vermitteln und dementsprechend kleiner sind. Die Kernkraft hat allerdings nur eine kurze Reichweite und wirkt nur auf benachbarte Nukleonen.

Dies ist im Unterschied z.B. zur Gravitations-Wechselwirkung, die wegen der  $1/R$ -Abhängigkeit eine unendliche Reichweite besitzt. Wegen der Variation der potentiellen Energie in einer homogenen Kugel steigt z.B. die Dichte der Erde zum Zentrum hin an. Die Kernkraft oder **starke Wechselwirkung** hat dagegen eine kurze Reichweite und das entsprechende bindende Potential der Nukleonen besitzt einen flachen Boden, wie in Abb. 3.3 illustriert.

### Ladungsverteilung

Verwendet man geladene Teilchen z.B. He-Kerne wie beim Rutherford-Experiment, so läßt sich in Streuexperimenten die Ladungsverteilung im Atomkern bestimmen. Damit diese aufgelöst werden kann, muß die deBroglie Wellenlänge des Projektils kleiner als die Ausdehnung des Kern sein<sup>1</sup>:

<sup>1</sup>Dies gilt auch für die Neutronen-Streuung zur Bestimmung der Dichteverteilung



**Abbildung 3.3:** (a) Die starke Wechselwirkung hat eine kurze Reichweite, und der Boden des Potentialtopfs ist flach. Dies bedingt eine homogene Masse-Verteilung im Atomkern. (b) Die Gravitations-Wechselwirkung hat eine unendliche Reichweite. Damit hängt die potentielle Energie vom Ort innerhalb einer homogenen Kugel mit Radius  $R_0$  ab.

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2mE_{kin}}} \quad (3.4)$$

Im Experiment stellt sich heraus, dass die Ladungsverteilung sehr *inhomogen* über den Atomkern verteilt ist. Dementsprechend besitzen Atomkerne nicht nur ein elektrisches Dipolmoment, sondern auch höhere Momente wie Quadrupolmoment etc. Dies ist im Gegensatz zur Atomphysik, wo das Dipolmoment in der Regel der dominante Term ist.

Die Ladungsverteilung in den Streuexperimenten verbirgt sich in dem sogenannten **Formfaktor**. Wie bei der Behandlung der Laue-Beugung betrachten wir Streuereignisse an einem Volumenelement innerhalb des Atomkerns. Die einfallende ebene Welle mit Wellenvektor  $\vec{k}$  wird elastisch gestreut ( $|\vec{k}'| = |\vec{k}|$ ) und erzeugt eine auslaufende Kugelwelle mit Wellenvektor  $\vec{k}'$ :

$$\begin{array}{ll} \text{einlaufende ebene Welle} & e^{i\vec{k}\vec{r}} \\ \text{auslaufende Kugel - Welle} & \frac{1}{R} e^{i\vec{k}'\vec{r}} e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\vec{r}} \end{array}$$

Die auslaufende Welle beschreibt die Amplitude im Abstand  $R$  vom Atomkern am Ort  $\vec{r}$  ( $R = |\vec{r}|$ ), die Koordinate  $\vec{r}'$  - den Ort innerhalb des Atomkerns, gemäß Abb. 3.4.

Der differentielle Wirkungsquerschnitt wird damit zu:

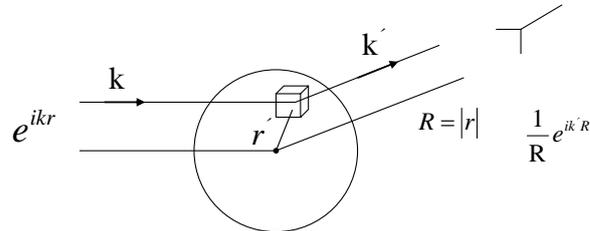


Abbildung 3.4: Streuung einer ebenen Welle an einem Atomkern .

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{d\sigma}{d\Omega} \Big|_{\text{Rutherford}} \left| \int \rho(\vec{r}') e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\vec{r}'} d\vec{r}' \right|^2 \quad (3.5)$$

mit dem Formfaktor  $F$ :

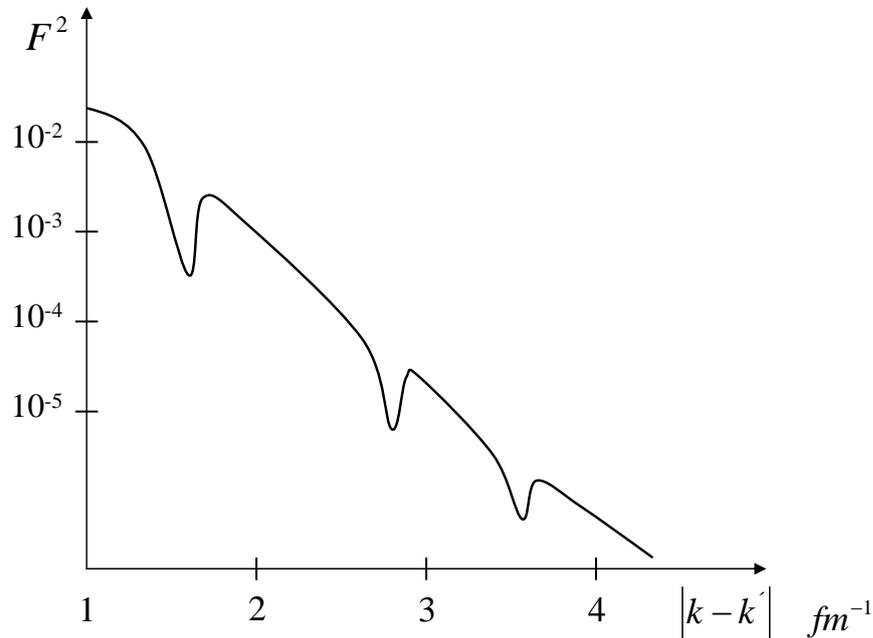
$$F = \int \rho(\vec{r}') e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\vec{r}'} d\vec{r}' \quad (3.6)$$

der die Phasenverschiebung durch Streuereignisse an unterschiedlichen Orten im Atomkern auflöst. Durch diesen Formfaktor entstehen Beugungseffekte, da die deBroglie Wellenlänge des Projektils in der Größenordnung des Kerndurchmessers liegt. Die Streuung ist stärker bei kleinen Streuwinkeln bzw. Vorwärtsstreuung (siehe Abb. 3.5).

Die Dominanz der Vorwärtsstreuung und die Beugungseffekte treten immer auf, wenn die Wellenlänge der Strahlung (Wellenlänge bei Photonen bzw. deBroglie-Wellenlänge bei Materieteilchen) in derselben Größenordnung wie die Ausdehnung des Streuers ist. Bekanntes Beispiel ist die Mie-Streuung von sichtbarem Licht an Wassertropfen.

### 3.1.2 Innere Struktur

Um die Struktur eines Atomkerns zu beschreiben, kann man zunächst den Ansatz verwenden, daß dieser sich aus den schon bekannten Teilchen Proton und Elektron zusammensetzt. So kann ein Deuteron als doppelt schweres Wasserstoffatom (Deuterium-Kern) sich aus 2 Protonen und einem Elektron zusammen setzen. Damit wäre die Massenzahl 2 und die Ladung einfach positiv. Allerdings führt dieses Modell zu einem Gesamtspin des Deuteron von  $1/2$  bzw.  $3/2$ . Die Hyperfeinstrukturaufspaltung, die man beim Deuteriumatom beobachtet, widerspricht diesen Kernspin Einstellungen. Nachdem keine Hyperfeinstrukturaufspaltung zu beobachten ist, muß das Deuteron ein Spin



**Abbildung 3.5:** Der Formfaktor beschreibt die innere Struktur eines Atomkerns. Die Minima entstehen durch Beugungseffekte, da die deBroglie Wellenlänge des Projektils in der Größenordnung des Kerndurchmessers liegt.

0-Teilchen sein. Dies kann nur erklärt werden, wenn man annimmt, daß das Deuteron direkt aus einem Proton und einem neutralen schweren Teilchen mit Spin  $1/2$  besteht. Dieses Teilchen ist das **Neutron**, wie in Abb. 3.14 illustriert.

Die Notation der Atomkerne ist gemäß:

$$\boxed{{}_Z^A X} \quad (3.7)$$

Ein Element  $X$  besitzt  $Z$  Protonen und eine Nukleonenzahl  $A$ . Die Zahl der Neutronen ist  $A - Z$ . Elemente mit gleicher Protonenzahl  $Z$  aber unterschiedlicher Neutronenzahl  $N$  bezeichnet man als **Isotope**, da sie wegen ihrer gleichartigen Elektronenhülle das gleiche chemische Verhalten zeigen. Elemente mit gleicher Neutronenzahl  $N$  bezeichnet man als **Isotone**. Elemente mit gleicher Massenzahl  $A$  bezeichnet man als Isobare.

Das **Neutron** selbst wurde von Chadwick 1932 nachgewiesen. Er untersuchte den Beschuß von Beryllium mit Helium-Kernen. Man ging der Vermutung nach, daß das postulierte Elektron im Atomkern angeregte Zustände

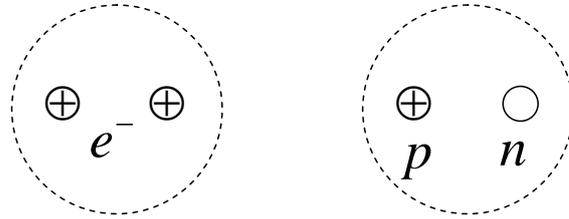
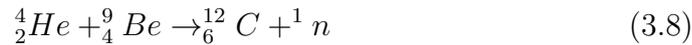


Abbildung 3.6: Mögliche innere Struktur eines Deuteron.

durchlaufen kann und ähnlich wie bei der Atomphysik Strahlung emittiert. Im Experiment hat man in der Tat energetische Strahlung beobachtet, die sich neutral verhielt, allerdings auch durch dicke Bleiplatten nicht abzuschirmen war. Aus diesem Grund schloss man schon frühzeitig Photonen ( $\gamma$ -Quanten) als Produkt der He-Be Reaktion aus. Die Reaktion:



kann die Experimente zwanglos erklären. Das *freie* Neutron zerfällt nach der schwachen Wechselwirkung mit einer Lebensdauer von 877 s in:

$$n \rightarrow p^+ + e^- + \bar{\nu} \quad (3.9)$$

mit  $p$  dem Proton,  $e^-$  dem Elektron und  $\bar{\nu}$  dem Anti-Neutrino, wie weiter unten noch diskutiert wird.<sup>2</sup> Das entstandene hochenergetische Proton konnte man nachweisen.

### 3.1.3 Magnetische Kern-Momente

#### magnetisches Dipolmoment

Atomkerne besitzen ein magnetisches Moment. Der Gesamtdrehimpuls des Atomkerns setzt sich (wie bei der Diskussion der Elektronenhülle der Atome) aus dem Spin  $I_i$  der Nukleonen und einem Anteil  $L_i$  für deren Bahndrehimpuls zusammen:

$$\vec{I} = \sum_i (\vec{I}_i + \vec{L}_i) \quad (3.10)$$

<sup>2</sup>Nach der Kernreaktion 3.9 ist die Summe der Ladungen vor und nach der Reaktion gleich, wie auch die Summe der Spins.

Das magnetische Moment  $\vec{\mu}_I$  ergibt sich aus dem Drehimpuls  $\vec{I}$ , dem Kernmagneton  $\mu_K$  und einem  $g$ -Faktor, der die Kopplung von  $\vec{L}$  und  $\vec{I}_i$  berücksichtigt.

$$\vec{\mu}_I = g_I \mu_K \frac{\vec{I}}{\hbar} \quad (3.11)$$

Bei Protonen zeigt das magnetische Moment  $\vec{\mu}_I$  immer in dieselbe Richtung wie der Drehimpuls  $\vec{I}$ , da es sich um positive Teilchen handelt (vgl.  $\vec{\mu} \propto -\vec{l}$  bei Elektronen). Das **Kernmagneton**  $\mu_K$  ist:

$$\mu_K = \frac{e}{2m_p} \hbar = 5.050 \cdot 10^{-27} \text{JT}^{-1} \quad (3.12)$$

Die  $g$ -Faktoren für ein einzelnes Proton und ein Neutron lassen sich aus der Messung der Hyperfeinstruktur ableiten:

$$g_p = 5.58556 \quad (3.13)$$

$$g_n = -3.8263 \quad (3.14)$$

Aus der Anzahl der Hyperfeinstrukturlinien erkennt man zusätzlich, daß das Proton und das Neutron jeweils Spin-1/2 Teilchen sind.

Da die  $g$ -Faktoren rationale Zahlen sind, können das Proton und das Neutron *keine* Elementarteilchen sind. Für ein Elementarteilchen, wie das Elektron, erwartet man z.B. einen  $g$ -Faktor von 2, wie er allgemein für ein geladenes Teilchen aus der Dirac-Gleichung resultiert. D.h. das Proton und das Neutron müssen seinerseits aus weiteren Teilchen zusammen gesetzt sein. Dies ist Thema der Teilchenphysik.

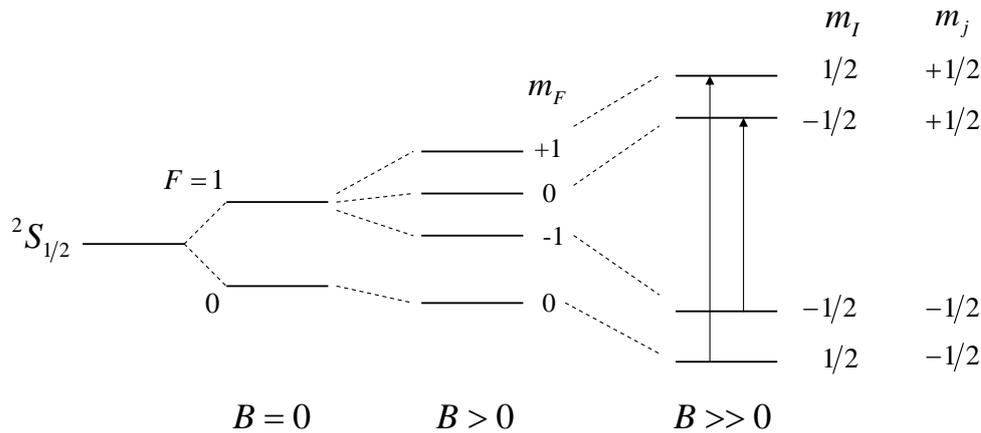
Wie lassen sich jetzt magnetische Momente eines Kerns präzise messen? Beim sog. **Rabi-Experiment** geht man wie folgt vor. Ein Wasserstoff-Atomstrahl durchläuft eine Abfolge von Magnetfeldern. Der Grundzustand des Wasserstoffatoms ist  $^2S_{1/2}$ . Nach der Hyperfeinstruktur spaltet er auf in ein Niveau  $F=0$  und  $F=1$  ( $\vec{F}$  setzt sich zusammen aus dem Kernspin  $\vec{I}$  und dem Gesamtdrehimpuls der Elektronenhülle  $\vec{J}$ :  $\vec{F} = \vec{I} + \vec{J}$ ). D.h. ohne äußeres Magnetfeld ist der Energieunterschied zwischen dem  $F=0$  und  $F=1$  Niveau:

$$\Delta E_{HFS} = \frac{2}{3} \mu_0 g_e \mu_B g_p \mu_K |\Psi(r=0)|^2 \quad (3.15)$$

mit  $|\Psi(r=0)|$  dem Betrag der  $1s$ -Wellenfunktion am Kernort. Diese Energieaufspaltung absorbiert bzw. emittiert die 21 cm Strahlung, die in der Radioastronomie als Nachweis von interstellarem Wasserstoff verwendet wurde.

Bei geringen Magnetfeldern ist die  $\vec{I}\vec{J}$ -Kopplung stark und das Niveau  $F=1$  spaltet in drei Niveaus auf (Zeeman-Aufspaltung). Bei stärkeren Magnetfeldern wird diese Kopplung aufgebrochen und  $\vec{I}$  und  $\vec{J}$  orientieren sich unabhängig voneinander zur Quantisierungsachse. Man erhält eine neue Reihung der Niveaus, wie in Abb. 3.7 gezeigt ist<sup>3</sup>). Die große Aufspaltung entsteht durch die Orientierung des Elektronenspins (proportional zu  $\mu_B$ ), während die kleine zusätzliche Aufspaltung durch die Orientierung des Kernspins entsteht ( $\mu_K \ll \mu_B$ ).

Zwischen diesen Niveaus existieren jetzt vier mögliche Übergänge, die durch die Absorption von Photonen (bei den geringen Energien entspricht das dem Einstrahlen eines elektrischen Wechselfeldes) induziert werden können<sup>4</sup>. Die Differenz zweier Linien zu unterschiedlicher Orientierung von  $\vec{I}$  ( $m_I = 1/2$  zu  $m_I = -1/2$ ) ist direkt proportional zum magnetischen Moment des Protons. Der Beitrag des Elektrons hebt sich dabei heraus.



**Abbildung 3.7:** Hyperfeinstrukturaufspaltung eines Wasserstoffatoms im Magnetfeld. Die Auswahlregel ist  $\Delta m_J = \pm 1$  und  $\Delta m_I = 0$ , bzw.  $\Delta m_J = 0$  und  $\Delta m_I = \pm 1$ .

Im Rabi-Experiment durchläuft ein Wasserstoffatom sukzessive zwei ma-

<sup>3</sup>Dies ist analog zum Übergang von der LS in die jj-Kopplung in der Atomphysik. Die Reihenfolge der Niveaus hängt von der potentiellen Energie der magnetischen Momente im Magnetfeld und von der Symmetrie der Gesamt-Wellenfunktion ab. Zeigen Kernspin und Elektronenspin in dieselbe Richtung, muß die Ortswellenfunktion antisymmetrisch sein, und der Abstand Elektron Kern ist groß. Dies ist energetisch ungünstig, da die anziehende Coulomb-Wechselwirkung zwischen negativem Elektron und positivem Proton gering ist.

<sup>4</sup>Dies sind magnetische Dipolübergänge, da der Drehimpuls  $\vec{L}$  des Systems sich nicht ändert

netische Gradientenfelder. In diesen Feldgradienten erfährt das Wasserstoffatom je nach Ausrichtung des magnetischen Momentes eine Kraft gemäß:

$$\vec{F} = \vec{\mu} \nabla \vec{B} \quad (3.16)$$

Die Ablenkung in dem ersten Gradientenfeld wird in dem zweiten gleich orientierten Gradientenfeld noch erhöht. D.h. ein Detektor hinter einer Blende auf der Achse misst kein Signal durch auftreffende Wasserstoffatome. Zwischen den beiden Magnetfeldern wird eine Spule eingesetzt, die ein elektrisches Wechselfeld einstrahlt. Trifft die Frequenz genau die Übergangsfrequenz zwischen zwei Niveaus gemäß Abb. 3.7, so klappt der Spin des Elektrons um. Durch die Änderung der Ausrichtung des magnetischen Moments des Wasserstoffatoms wird die Ablenkung im Gradientenfeld 1 im Gradientenfeld 2 genau rückgängig gemacht. D.h. Protonen können einen Detektor erreichen, wie in Abb. 3.8 verdeutlicht. Dieser Aufbau wird erweitert durch ein konstantes Magnetfeld im Bereich der HF-Spule, um den Hyperfeinstrukturübergang gemäß dem Zeemaneffekt aufzuspalten. Hierbei ist das Magnetfeld so stark, dass die Kopplung gemäß Quantenzahl  $F$  aufbricht und die einzelnen Quantenzahlen  $j$  für die Elektronenhülle und  $I$  für den Kern das magnetische Moment bestimmen. Man vergleicht jetzt die Übergänge für  $\Delta m_j = \pm 1$  und  $\Delta m_I = 0$  sowie die Übergänge für  $\Delta m_j = 0$  und  $\Delta m_I = \pm 1$ . Diesen Unterschied kann man für variables Magnetfeld aufgetragen und zu dem Punkt  $B=0$  extrapoliert. Damit läßt sich die Zeeman-Aufspaltung der Hyperfeinstruktur sehr genau bestimmen und damit das magnetische Moment des Protons.

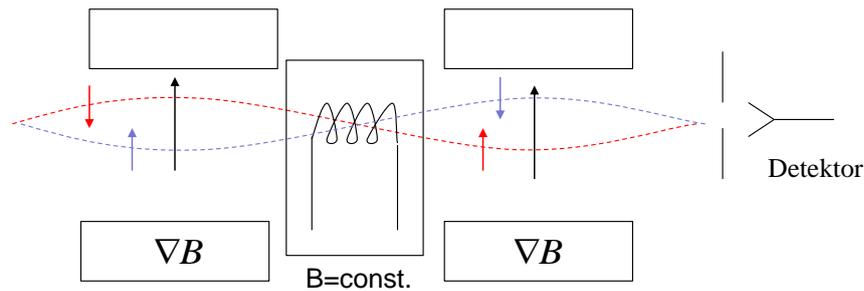


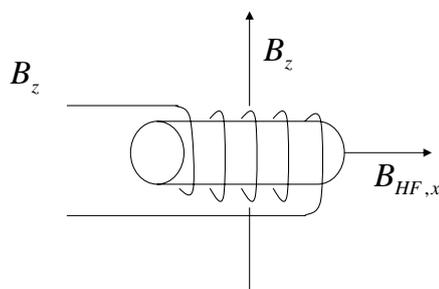
Abbildung 3.8: Rabi-Experiment.

Nach diesem Prinzip funktionieren auch Atomuhren. Hier werden direkt Hyperfeinstrukturübergänge in Cäsiumatomen ( $F = 3 \rightarrow F = 4$ ) angeregt, und das Signal am Detektor mit der Frequenz der eingestrahlteten HF-Strahlung gekoppelt. Diese Frequenz ist dann das Zeitnormal.

## Kernspinresonanz

Die Ausrichtung des magnetischen Kernmoments wird bei der Diagnostikmethode Kernspinresonanz ausgenutzt. Betrachten wir zunächst eine Probe bestehend aus Wasserstoffatomen in einem starken äußeren Magnetfeld in  $z$ -Richtung  $B_z$ . Die  $z$ -Komponente des Kernspins ist quantisiert und das magnetische Moment präzediert mit der Larmorfrequenz um die  $z$ -Richtung. Im Mittel zeigt die makroskopische Magnetisierung der Probe in  $z$ -Richtung.

Auf die Probe wird jetzt mittels einer Spule ein Magnetfeld  $B_{rf,x}$  in  $x$ -Richtung erzeugt, wie in Abb. 3.9 illustriert. Diese Wechselwirkung der Magnetisierung mit dem Magnetfeld sei im folgenden klassisch betrachtet.



**Abbildung 3.9:** Anordnung für die Messung der Kernspinresonanz

Das Magnetfeld  $B_{rf,x}$  wirkt eine bestimmte Zeit  $t$  auf das Spinsystem ein. Die Richtung des Drehimpulses ändert sich durch ein äußeres Magnetfeld gemäß

$$\frac{d\vec{I}}{dt} = \vec{M} \times \vec{B} \quad (3.17)$$

mit dem **gyromagnetischen Verhältnis**  $\gamma$

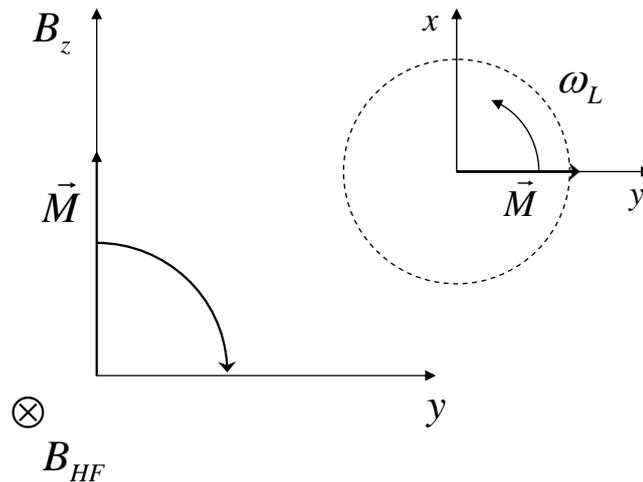
$$\vec{M} = \gamma \sum_i \vec{I}_i = \gamma \vec{I} \quad (3.18)$$

ergibt sich

$$\frac{d\vec{M}}{dt} = \gamma \vec{M} \times \vec{B} \quad (3.19)$$

Die stationäre Lösung dieser Gleichung in einem gleichförmigen Feld  $B_z$  ergibt eine makroskopische Magnetisierung, die in  $z$ -Richtung orientiert ist.

Wirken jetzt ein zusätzliches Feld  $\vec{B}_{rf,x}$  für eine bestimmte Zeitdauer  $t$  ein, so kann die makroskopische Magnetisierung  $M_z$  in die  $y$ -Richtung gekippt werden. Ein solchen Puls bezeichnet man als **90°-Puls** (siehe Abb. 3.10).



**Abbildung 3.10:** Mit einem 90°-Puls läßt sich die Magnetisierung in die  $xy$ -Ebene klappen.

In der  $xy$ -Ebene präzediert jetzt die Magnetisierung mit der Larmorfrequenz. Nach dieser Erregung kann dieselbe Spule auch als Empfänger dienen (Purcell-Methode), die die präzedierende Magnetisierung wegen  $\nabla \times E = -\dot{B}$  als Spannungspuls detektiert. Dieses Signal nimmt mit der Zeit durch zwei Relaxationsprozesse ab: (i) bei der **transversalen Relaxation** läuft die Phase zwischen den einzelnen präzedierenden Spins auseinander, da die exakte Magnetfeldstärke am Ort eines jeden Spins leicht unterschiedlich ist. Die Magnetisierung in der  $xy$ -Ebene nimmt auf einer kurzen Zeitkonstante ab. (ii) bei der **longitudinalen Relaxation** führt die Wechselwirkung der präzedierenden Spins mit dem Kristallgitter der Probe zu Übergängen in den Grundzustand. D.h. die Magnetisierung dreht sich in die  $z$ -Richtung zurück. Die absoluten Zeitkonstante hängen von der lokalen Umgebung der Protonen ab.

Das zeitliche Verhalten der einzelnen Magnetisierungen sind durch die **Bloch-Gleichungen** beschrieben, die die allg. Gl. 3.19 und die Relaxationsprozesse zusammenfasst:

$$\frac{dM_z}{dt} = \gamma \left( \vec{M} \times \vec{B} \right)_z + \frac{M_0 - M_z}{T_1} \quad (3.20)$$

$$\frac{dM_x}{dt} = \gamma \left( \vec{M} \times \vec{B} \right)_x - \frac{M_x}{T_2} \quad (3.21)$$

$$\frac{dM_y}{dt} = \gamma \left( \vec{M} \times \vec{B} \right)_y - \frac{M_y}{T_2} \quad (3.22)$$

Im folgenden seien drei unterschiedliche Anordnungen zur gepulsten Messung der Kernspinresonanz beschrieben:

- **freier Zerfall der Induktion**

In der einfachsten Anordnung wird zunächst ein  $90^\circ$  Puls eingestrahlt und die Magnetisierung in die  $xy$ -Ebene gedreht. Ein hohes Signal wird in der Erreger-Spule detektiert, das mit der Zeit abnimmt, da die Magnetisierung durch die Relaxationsprozesse in die  $z$ -Richtung zurückkehrt.

- **Spin-Echo-Verfahren**

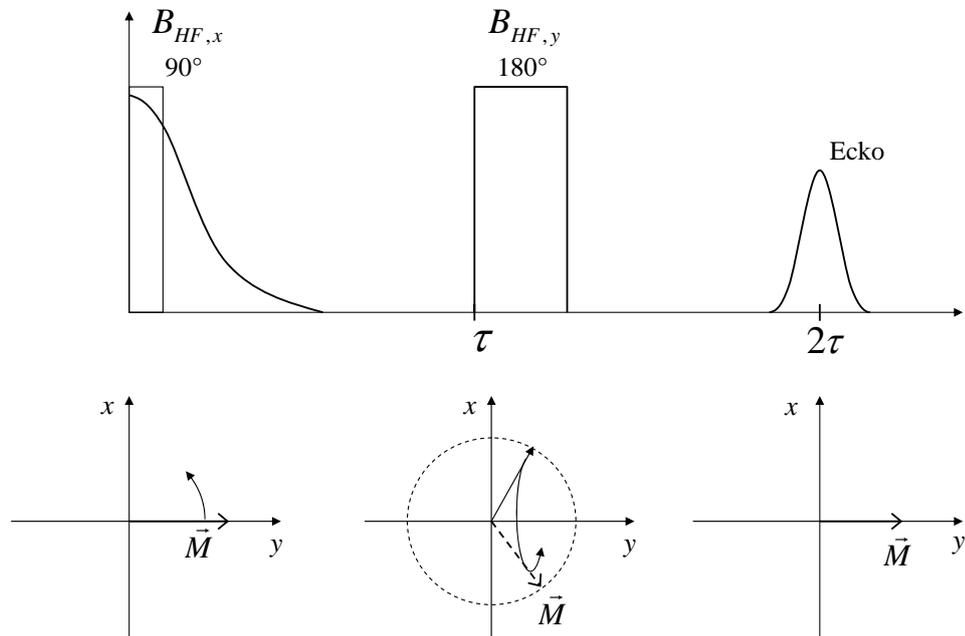
Nachdem die transversalen und longitudinalen Relaxationsprozesse sich überlagern, ist die alleinige Bestimmung einer einzelnen Zeitkonstante  $T_1$  oder  $T_2$  schwierig. Dies kann man auflösen durch das **Spin-Echo-Verfahren**: Zunächst wird die Magnetisierung über einen rf-Puls gemäß  $B_{rf,x}$  in die  $xy$ -Ebene in Richtung der  $y$ -Achse gelegt. Anschließend führt die Spin-Spin-Relaxation zu einem Auseinanderlaufen der Phase der einzelnen Spins. Nach einer Zeit  $\tau$  wird ein  $180^\circ$  Puls eingestrahlt entsprechend einem Feld  $B_{rf,y}$ , der die Spins um  $180^\circ$  um die  $y$ -Achse dreht. Wie man in Abb. 3.11 sieht, präzedieren die einzelnen Spins danach in einer Weise, die zu einer Kompensation des Phasenunterschieds führt<sup>5</sup>. Zu einer Zeit  $2\tau$  hat sich die ursprüngliche Magnetisierung wieder eingestellt und man beobachtet ein Echo. Der Unterschied in den Signalhöhen zu den Zeitpunkten  $t = 0$  und  $t = 2\tau$  hängt jetzt *nur* noch von Spin-Gitter Relaxation  $T_1$  während des Zeitraums  $2\tau$  ab.

- **Kernspin-Tomografie**

Bei der Kernspin-Tomografie zur Untersuchung von biologischen Systemen detektiert man in der Regel Protonen. Bei einem Magnetfeld von 1 T ist die notwendige rf-Frequenz zum Umklappen der Spins 42 MHz. Bei einer ausgedehnten Probe verwendet man ein magnetisches Gradientenfeld, so daß bei einer bestimmten eingestrahelten rf-Frequenz immer nur ein bestimmter Bereich in der Probe zum Resonanzsignal

---

<sup>5</sup>Spins, die wegen eines hohen lokalen Magnetfeldes sehr weit in der Phase voraus laufen, müssen nach dem  $180^\circ$ -Puls auch einen größeren Phasenunterschied wieder aufholen.



**Abbildung 3.11:** Beim Spin-Echo-Verfahren wird nach einer Zeit  $\tau$  ein  $180^\circ$ -Puls eingestrahlt, der die Spins um die  $y$ -Achse dreht. Damit laufen sie in der Phase zurück und ein Echo wird zum Zeitpunkt  $t = 2\tau$  beobachtet.

beiträgt. Variiert man die rf-Frequenz, so variiert man den Ort und man erhält eine abbildende Methode. Die Intensität des Signals ist ein Maß für die Protonendichte und ergibt damit einen Materialkontrast.

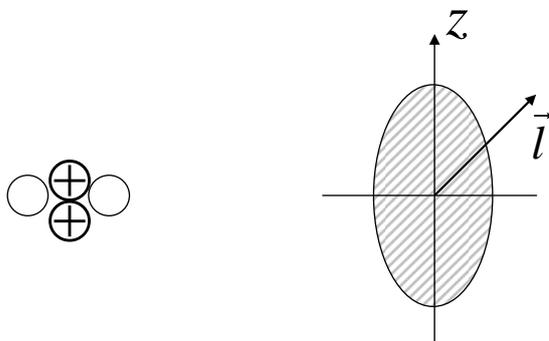
### 3.1.4 Elektrische Kern-Momente

Durch die sehr inhomogene Ladungsverteilung besitzen Atomkerne in der Regel ausgeprägte höhere elektrische Momente. Das Dipolmoment definiert sich zu:

$$p = e \int \rho(r') r' dV' \quad (3.23)$$

und das Quadrupolmoment zu:

$$q = e \int \rho(r') [3z^2 - r'^2] dV' \quad (3.24)$$



**Abbildung 3.12:** Die Ladungsverteilung ist in der Regel räumlich inhomogen. Durch die Abweichung von der Kugelsymmetrie entstehen signifikante Quadrupolmomente.

## 3.2 Bindungsenergie - Atomkerne

Betrachtet man die Masse eines Atomkerns  $M_k$  und vergleicht diese mit den Massen seiner Konstituenten Proton  $m_p$  und Neutron  $m_n$ , so beobachtet man eine fehlende Masse, den sog. **Massendefekt**:

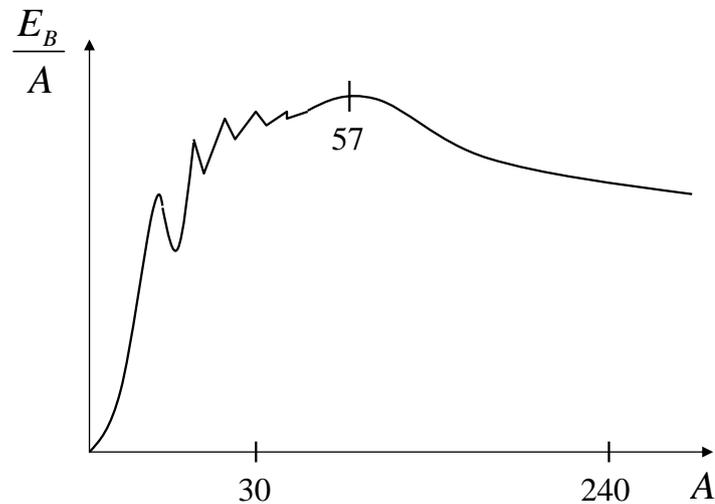
$$M_K = \sum m_p + \sum m_n - \Delta M \quad (3.25)$$

Nach dem Äquivalenz zwischen Energie und Masse entspricht dieser Massendefekt der Bindungsenergie  $E_B$  eines Atomkerns:

$$\Delta M = \frac{E_B}{c^2} \quad (3.26)$$

Trägt man diese Bindungsenergie pro Nukleon über der Nukleonenzahl  $A$  in einem Atomkern auf, so erkennt man bei kleiner Nukleonenzahl einen starken Anstieg. Bei  $A=57$  ist das Maximum und zu größeren Atomkernen nimmt die Bindungsenergie wieder ab. Dies ist in Abb. 3.13 verdeutlicht.

Anhand dieses Verhaltens der Bindungsenergie pro Nukleon läßt sich sofort ablesen, daß das Spalten von Atomen mit Massen größer 57 Energie frei setzt - die **Kernspaltung**, als auch das Verschmelzen von Atomkernen mit Massen kleiner 57 - der **Kernfusion**. Der Energiegewinn beim Verschmelzen sehr kleiner Atomkerne wie Wasserstoff und Helium setzt ein Vielfaches der Energie frei wie das Spalten sehr schwerer Elemente.



**Abbildung 3.13:** Die Bindungsenergie pro Nukleon durchläuft mit steigender Massenzahl ein Maximum bei Eisen.

### 3.2.1 Tröpfchenmodell

Der Verlauf der Bindungsenergie pro Nukleon läßt sich phänomenologisch aus mehreren Anteilen zusammen setzen. Dies bezeichnet man als Tröpfchenmodell.

- **Volumenenergie**

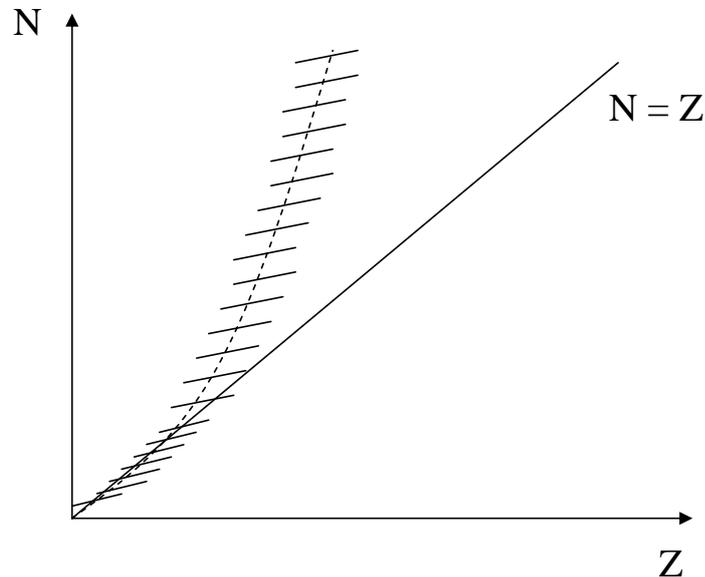
Ein Anteil der Bindungsenergie ist die Volumenenergie. Die Kernkraft, die die Nukleonen zusammenhält, hat anscheinend eine sehr kurze Reichweite, da man nur die Bindungsenergie der jeweiligen benachbarten Nukleonen berücksichtigen muß. D.h. die Volumenenergie skaliert nur linear mit der Anzahl der Nukleonen  $A$ <sup>6</sup>.

$$E_{B_1} = a_v A \quad (3.27)$$

- **Oberflächenenergie**

Diese Volumenenergie muß besonders bei kleinen Werten für  $A$  um die Oberflächenenergie korrigiert werden, da auf der Oberfläche des

<sup>6</sup>Bei einer paarweisen Wechselwirkung aller Nukleonen untereinander müsste die Volumenenergie mit  $A^2$  skalieren.



**Abbildung 3.14:** Die Neutronenzahl ist für schwere Kerne in der Regel größer als die Protonenzahl  $Z$ .

Atomkerns die Zahl der nächsten Nachbarn geringer ist als im Zentrum des Atomkerns.

$$E_{B_2} = -a_s A^{2/3} \quad (3.28)$$

- **Asymmetrie-Energie**

Die Nukleonen lassen sich als Konstituenten eines freien Fermigas darstellen, das in einem Potentialtopf gebunden ist. Die Zahl  $N$  der Neutronen ergibt sich aus der Besetzung der Zustände bis zu einer Fermienergie  $E_F$ :

$$N = \int_0^{E_F} \frac{dN}{dE} dE \quad (3.29)$$

Die Fermienergie ist

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m} \left( 3\pi^2 \frac{N}{V} \right)^{2/3} \quad (3.30)$$

Die Gesamtenergie der Neutronen ist damit:

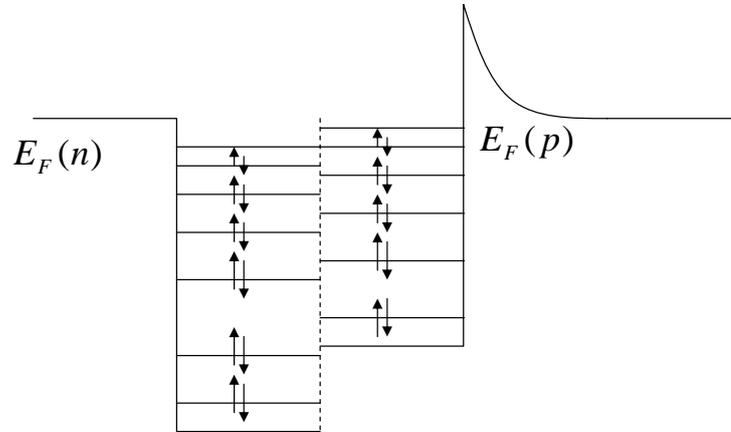


Abbildung 3.15: Nucleonen als Fermigas.

$$E_N = \int_0^{E_F} E \frac{dN}{dE} dE = \frac{3}{5} N E_F \quad (3.31)$$

Damit wird  $E_0$  proportional zu

$$E_N \propto \frac{N^{5/3}}{A^{2/3}} \quad (3.32)$$

Die Gesamtenergie des Fermigas, bestehend aus Neutronen und Protonen, ist:

$$E = C \frac{N^{5/3} + Z^{5/3}}{A^{2/3}} \quad (3.33)$$

Wenn sich die Zahl der Neutronen stark von der Zahl der Protonen unterscheidet, erhöht sich signifikant die Fermienergie. Bei einer gleichmäßigen Besetzung der Zustände für Protonen und Neutronen ( $N = Z = A/2$ ) wird diese Gesamtenergie schon durch die Volumenenergie berücksichtigt. Eine Ungleichverteilung von Protonen und Neutronen entspricht einer zusätzlichen Korrektur von:

$$\Delta E = \frac{C}{A^{2/3}} \left( N^{5/3} + Z^{5/3} - 2 \left( \frac{A}{2} \right)^{5/3} \right) \quad (3.34)$$

wenn man in dieser Formel zunächst die Ersetzung  $T_z = \frac{1}{2}(Z - N)$  macht und anschließend in der Näherung  $T_z \ll A/2$  entwickelt, bekommt man:

$$\Delta E \propto (Z - N)^2 \quad \text{oder} \quad \Delta E \propto \left(Z - \frac{A}{2}\right)^2 \quad (3.35)$$

Damit wird der Fermi-Beitrag zur Asymmetrie-Energie zu

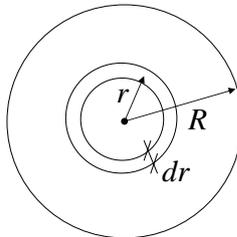
$$E_{B_3} = -a_f \frac{\left(Z - \frac{A}{2}\right)^2}{A} \quad (3.36)$$

- **Coulomb-Energie**

Die Coulomb-Energie beschreibt die Tatsache, daß durch die Protonen im Atomkern eine homogen geladenes Volumen entsteht. Die Ladungsdichte ist:

$$\rho = \frac{Ze}{\frac{4\pi}{3}R^3} \quad (3.37)$$

mit  $R$  dem Radius des Atomkerns.



**Abbildung 3.16:** Coulomb-Energie einer homogen geladenen Kugel.

Die eingeschlossene Ladung in einer Kugel mit Radius  $r$  ist:

$$Q(r) = \int_0^r \rho 4\pi r^2 dr \quad (3.38)$$

Die Coulomb-Energie ist:

$$E_c = \frac{qQ(r)}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (3.39)$$

mit  $q$  der Ladung einer Schale der Dicke  $dr$  im Abstand  $r$ , wie in Abb. 3.16 illustriert ist.

$$q = 4\pi r^2 \rho dr \quad Q(r) = \rho \frac{4\pi}{3} r^3 \quad (3.40)$$

Damit wird der Anteil der potentiellen Energie zu:

$$dE_{pot} = \frac{r}{\epsilon_0} \rho dr Q(r) \quad (3.41)$$

bzw. nach Integration zu

$$E_0 = \int_0^R \frac{r}{\epsilon_0} \rho Q(r) dr \propto \frac{Z^2}{R} \quad (3.42)$$

Die Coloumb-Energie ist schließlich

$$E_{B_4} = -a_c \frac{Z^2}{A^{1/3}} \quad (3.43)$$

### • Paarungs-Energie

Als letzter Beitrag betrachten wir noch die Paarungs-Energie, die einer Korrektur entspricht je nachdem, ob die Zahl der Neutronen bzw. Protonen gerade oder ungerade ist. Die Abhängigkeit bezüglich der Gesamtzahl der Nukleonen ist rein empirisch:

$$E_{B_5} = a_p A^{-1/2} \delta \quad (3.44)$$

mit

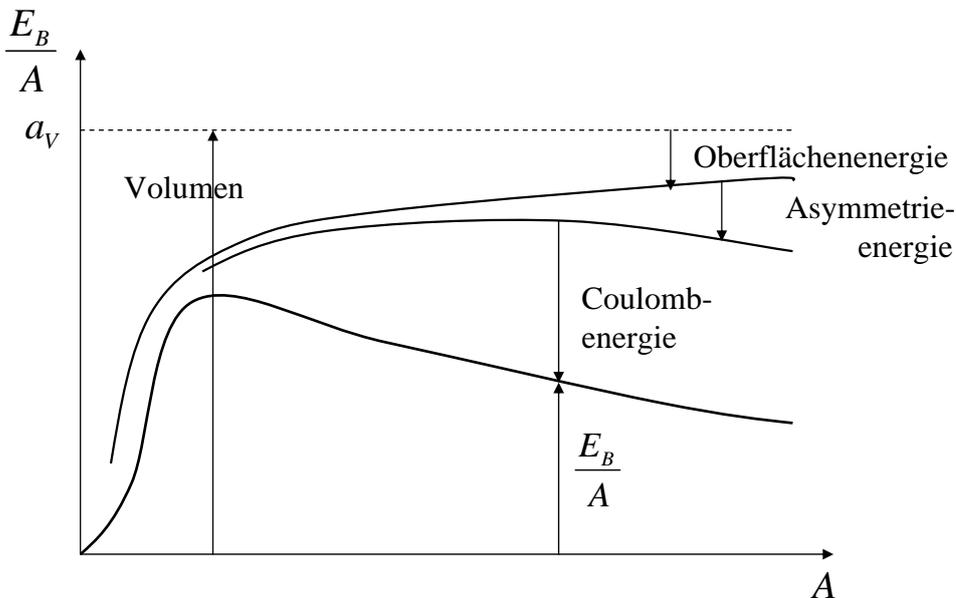
$$\delta = \begin{cases} +1 & \text{gg - Kerne} \\ 0 & \text{gu/ug - Kerne} \\ -1 & \text{uu - Kerne} \end{cases} \quad (3.45)$$

**gg** bezeichnet Kerne, in denen die Protonen- *und* die Neutronenzahl gerade ist. **gu** bezeichnet Kerne, in denen die Protonenzahl gerade und die Neutronenzahl ungerade ist. **ug** bezeichnet Kerne, in denen die Protonenzahl ungerade und die Neutronenzahl gerade ist. **uu** bezeichnet Kerne, in denen die Protonen- *und* die Neutronenzahl ungerade ist.

Alle Beiträge zusammen genommen ergeben die Bindungsenergie:

$$E_B = a_v A - a_s A^{2/3} - a_f \frac{(Z - \frac{A}{2})^2}{A} - a_c Z^2 A^{-1/3} + \delta a_p A^{-1/2} \quad (3.46)$$

mit  $a_v=15.84$  MeV,  $a_s=18.33$  MeV,  $a_f=93.15$  MeV,  $a_c=0.714$  MeV und  $a_p=11.2$  MeV. Dies bezeichnet man als **Bethe-Weizsäcker-Formel**, deren Verlauf in Abb. 3.17 dargestellt ist. Der Anstieg der Bindungsenergie pro Nukleon bei kleinen Werten für  $A$  wird durch den kleiner werdenden Anteil der OF-Energie verursacht. Der Abfall zu großen  $A$  wird durch einen wachsenden Beitrag der Coloumb-Energie bedingt<sup>7</sup>.



**Abbildung 3.17:** Tröpfchenmodell zur Beschreibung der Bindungsenergie pro Nukleon.

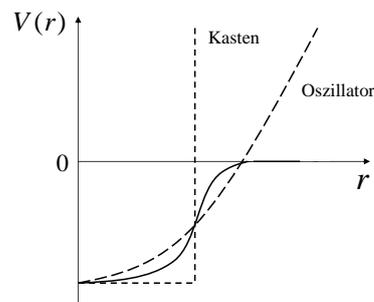
### 3.2.2 Schalenmodell (Vertiefung)

Das Tröpfchenmodell versagt allerdings bei einem sehr genauen Vergleich mit experimentellen Bindungsenergien. Insbesondere beobachtet man, daß die

<sup>7</sup>In Abb. 3.17 wird die Bindungsenergie pro Nukleon aufgetragen, d.h. der Beitrag der Oberflächenenergie  $A^{2/3}$  ist als  $A^{2/3}/A = A^{-1/3}$  aufgetragen. Damit sinkt dessen relativer Anteil bei steigender Nukleonenzahl  $A$ .

Bindungsenergie des äußersten Nukleons bei ganz bestimmten Neutronen- bzw. Protonenzahlen Maxima hat. So hat die Bindungsenergie des äußersten Neutrons ein Maximum bei den Neutronenzahlen 2,8,20,28,50,82,126. Entsprechendes gilt für das Entfernen des äußersten Protons, das besonders bei den Protonenzahlen 12,28,50,82 mit einer hohen Bindungsenergie verknüpft ist. Man bezeichnet diese Zahlen als **magische Zahlen**, da ihre Erklärung lange Zeit ausstand. Kerne, bei denen sowohl die Neutronen- als auch die Protonenzahl magisch ist, bezeichnet man als **doppelt magisch**. Sie sind besonders stabil.

In Anlehnung an die Atomphysik bestand die Vermutung, daß diese magischen Zahlen genau bei abgeschlossenen Schalen auftreten. Entsprechend der Atomphysik sollte man das quantenmechanische Problem lösen und die einzelnen Energieschalen mit ihrer Entartung sollten sich ergeben.



**Abbildung 3.18:** Das Bindungspotential im Atomkern liegt zwischen Kasten- und Oszillatorpotential.

Als Potentialtopf für die Nukleonen nimmt man das empirische **Woods-Saxon-Potential**:

$$V(r) = -\frac{V_0}{1 + e^{\frac{r-R_0}{b}}} \quad (3.47)$$

Für die Ableitung von analytischen Lösungen verwendet man aber entweder das Kastenpotential oder das Oszillatorpotential, die eine harte bzw. weiche Annäherung an das empirische Potential darstellen. Die Energieeigenwerte für einen dreidimensionalen Oszillator, der als Linearkombination von 3 eindimensionalen Oszillatoren mit Quantenzahlen  $n_x$ ,  $n_y$  und  $n_z$  beschrieben wird, ist:

$$E = \hbar\omega \left( n_x + \frac{1}{2} \right) + \hbar\omega \left( n_y + \frac{1}{2} \right) + \hbar\omega \left( n_z + \frac{1}{2} \right) = \hbar\omega \left( n + \frac{3}{2} \right) \quad (3.48)$$

n	g	2g	$\sum_n 2g$	mag. Zahlen
0	1	2	2	2
1	3	6	8	8
2	6	12	20	20
3	10	20	40	28
4	15	30	70	50

**Tabelle 3.1:** Vergleich der Entartung  $g$  des drei-dimensionalen Oszillators mit den magischen Zahlen

mit  $n = n_x + n_y + n_z$ . Betrachtet man die Kombinationen der drei Quantenzahlen  $n_x, n_y$  und  $n_z$ , die jeweils zu den selben Energie-Eigenwerten führen, so erhält man eine Entartung  $g$  von:

$$g = (n + 1) \left( \frac{n}{2} + 1 \right) \quad (3.49)$$

Trägt man diese Entartung auf und besetzt jedes Niveau mit  $2g$  Nukleonen entsprechend den zwei Spinrichtungen eines Neutrons, so bekommt man Besetzungen der abgeschlossenen Schalen, wie in Tab. 3.1 zusammen gestellt ist.

Man erkennt, dass nur die ersten drei magischen Zahlen richtig wiedergegeben werden. Diese Diskrepanz ist aufgelöst worden als die **Spin-Bahn-Kopplung** der Nukleonen berücksichtigt wurde. Während die Spin-Bahn-Kopplung für die Elektronen der Atomhülle nur eine kleine Korrektur darstellt (Feinstrukturaufspaltung), ist die Spin-Bahn-Kopplung für Nukleonen ein dominanter Beitrag. In der Atomphysik hat sich der Spin Term aus der relativistischen Dirac-Gleichung ergeben. Hier soll ein phänomenologischer Ansatz gewählt werden, in dem man ein effektives Potential  $V^{eff}$  benutzt, das um einen Term proportional zum zeitlichen Mittelwert des Skalarprodukts  $\langle \vec{l} \vec{s} \rangle$  erweitert ist:

$$V^{eff}(r) = V(r)|_{\text{Oszillator}} + V_{ls}(r) \vec{l} \vec{s} \frac{1}{\hbar^2} \quad (3.50)$$

Der Mittelwert von  $\vec{l} \vec{s}$  ist:

$$\langle \vec{l} \vec{s} \rangle = \frac{1}{2} [j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)] \hbar^2 \quad (3.51)$$

Nachdem für ein Nukleon der Spin  $s = \pm \frac{1}{2}$  ist, gibt es nur zwei Möglichkeiten für  $V^{eff}$ :

$$V^{eff} = V(r)|_{\text{Oszillator}} + \frac{1}{2} V_{ls} l \quad j = l + \frac{1}{2} \quad (3.52)$$

$$V^{eff} = V(r)|_{\text{Oszillator}} - \frac{1}{2}V_{ls}(l+1) \quad j = l - \frac{1}{2} \quad (3.53)$$

Damit ergibt sich eine Energieverschiebung der Niveaus proportional zur Quantenzahl  $l$  von:

$$\Delta E = (2l+1)\frac{1}{2}V_{ls} \quad (3.54)$$

Da  $V_{ls}$  negativ ist (wie  $V(r)|_{\text{Oszillator}}$ ), liegt das Niveau zu  $j = l + 1/2$  energetisch niedriger als das Niveau  $j = l - 1/2$ . Berücksichtigt man diese Korrektur, so spalten diejenigen Energieeigenwerte mit großer Quantenzahl  $l$  stark auf. Empirisch bestimmt sich die Verschiebung zu:

$$\Delta E = -\left(\frac{\vec{l}\vec{s}}{\hbar^2}\right)A^{-2/3}20\text{MeV} \quad (3.55)$$

Unter Berücksichtigung der entsprechenden Entartung entstehen dann genau dort Lücken auf der Energieskala, an der die Zahl der Neutronen die magischen Zahlen erreicht. Die identische Lösung wie Gl. 3.48 erhält man auch durch die direkte Lösung der drei-dimensionalen Schrödingergleichung für einen Oszillator. Für den Radialteil  $R(r)$  der Schrödingergleichung, der die Energieeigenwerte bestimmt, gilt mit  $u(r) = R(r)r$ :

$$\frac{d^2u}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left[ E - V(r) - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} \right] u = 0 \quad (3.56)$$

Mit dem Oszillator-Potential für  $V(r)$  ergibt sich:

$$E_{n,l} = \hbar\omega \left( 2n + l + \frac{3}{2} \right) \quad (3.57)$$

Nachdem hier  $n$  und  $l$  ganze Zahlen sind, sind die Energie-Eigenwerte identisch zu Gl. 3.48. Allerdings lassen sich jetzt auch Drehimpuls-Quantenzahlen ableiten. Vergleicht man Gl. 3.48 und Gl. 3.57, so bekommt man die mehrere Kombinationen aus  $n$  und  $l$ , die alle zum selben Energie-Eigenwert gehören. Dies ist in Tab. 3.2 gezeigt. Die Entartung ist jeweils  $2l + 1$ .

Durch die  $ls$ -Kopplung spalten jetzt die Niveaus zu endlichen Drehimpuls-Quantenzahlen auf. So wird aus einem  $1d$ -Niveau ein  $1\mathbf{d}_{3/2}$  und ein  $1\mathbf{d}_{5/2}$  entsprechend  $j = l - 1/2$  und  $j = l + 1/2$ . Die entsprechenden Verschiebungen der Niveaus sind in Abb. 3.19 gezeigt.

Weiterhin läßt sich ablesen, daß bei abgeschlossenen Schalen für den Gesamtdrehimpuls der Kerne  $\vec{I} = 0$  gilt. D.h. sie sind kugelsymmetrisch.

Das Modell, das wir bisher betrachten, ist ein Einzelteilchenmodell. Anscheinend beschreibt es die Bindungsverhältnisse in Atomkernen schon recht

n aus Gl.3.48	n aus Gl. 3.57	l aus Gl. 3.57	Notation (n+1)l	Entartung 2(2l+1)
0	0	0	1s	2
1	0	1	1p	6
2	1	0	2s	2
	0	2	1d	10
3	1	1	2p	6
	0	3	1f	14

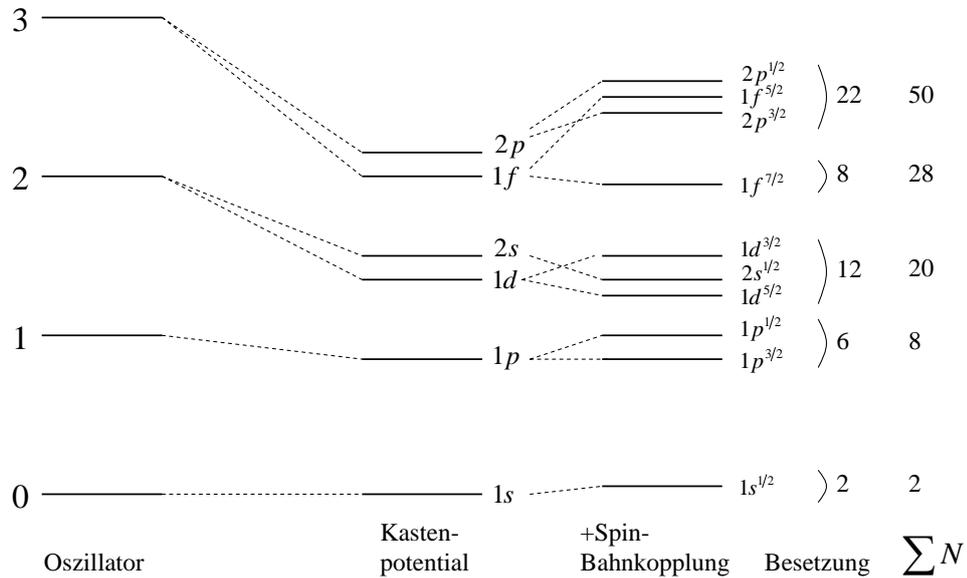
**Tabelle 3.2:** Quantenzahlen für das 3-dim Oszillatormodell mit den entsprechenden Entartungen.

gut. Bei einem Vielteilchen-Modell könnte sich generell die Art der Kopplung der Drehimpulse der einzelnen Nukleonen untereinander auswirken. So gilt für das Mehrelektronensystem der *Atomhülle* zum Teil *LS*-Kopplung, die bei größeren Atomen in eine *jj*-Kopplung übergeht. Bei *Atomkernen* gibt es diesen Übergang anscheinend nicht und es gilt immer *jj*-Kopplung, d.h. für jedes einzelne Nukleon koppelt  $\vec{l}$  und  $\vec{s}$  zu einem Drehimpuls  $\vec{j}$ .

### 3.2.3 Deformierte Kerne (Vertiefung)

Besonders bei schweren Kernen kann man allerdings eine Abweichung der postulierten Bindungsenergien des Schalenmodells von den beobachteten Bindungsenergien im Experiment feststellen. Dies läßt sich durch Rotationsanregung nicht sphärischer Kerne erklären. Diese beobachtet man insbesondere für schwere Kerne, bei denen die Zahl der Nukleonen stark von der einer geschlossenen Schale abweicht. Die Form dieser Kerne ist ein Rotationsellipsoid, das entweder als *oblat* (*z*-Achse entspricht kleiner Halbachse der Ellipse) oder als *prolat* (*z*-Achse entspricht großer Halbachse der Ellipse) bezeichnet wird (siehe Abb. 3.20)

Nach dem Tröpfchenmodell ergibt sich dies im wesentlichen aus dem Gleichgewicht zwischen Oberflächenenergie und Coloumb-Energie. Bei Änderung der Form von einer Kugel zu einer oblaten(prolaten) Form nimmt die Oberfläche und damit die Oberflächenenergie zu. Allerdings wird auch der Beitrag der Coloumb-Energie günstiger, da der Abstand der Protonen untereinander im Mittel zunimmt. Bei Kernen mit einer großen Protonenzahl ist die Absenkung der Coloumb-Energie dominant und eine prolate(oblate) Form entspricht dem Grundzustand. Die Rotationsenergie bei einem Kern mit Trägheitsmoment  $\Theta$  ist bei einem Drehimpuls der Rotation  $\vec{R}$  und einem Kernspin  $\vec{I}_0 = 0$ :



**Abbildung 3.19:** Schalenmodell des Atomkerns. Durch die ls-Kopplung spalten die Niveaus auf und es ergeben sich Energielücken bei den entsprechenden magischen Zahlen 2,8,20,28,50....

$$E_{rot} = \frac{\vec{R}^2}{2\Theta} \tag{3.58}$$

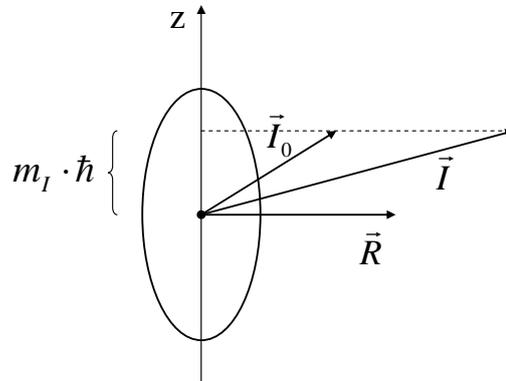
Besitzt der Kern zusätzlich einen Drehimpuls  $\vec{I}_0$ , so ergibt sich die Rotationsenergie aus  $\vec{I} = \vec{R} + \vec{I}_0$ . Hierbei ist die Quantisierungsachse für  $\vec{I}_0$  durch die Symmetrieachse des Kerns vorgegeben. Durch die entsprechende Projektion ist wegen  $I^2 = I_x^2 + I_y^2 + I_z^2$  die Rotationsenergie gegeben als:

$$E_{rot} = \frac{I_x^2}{2\Theta} + \frac{I_y^2}{2\Theta} = \frac{(I(I+1) - m_I^2) \hbar^2}{2\Theta} \tag{3.59}$$

### 3.2.4 Eigenschaft der Kernkraft

Die Eigenschaften der starken Wechselwirkung lassen sich in Streuexperimenten bestimmen. Verwendet man polarisierte Nukleonen, so beobachtet man daß die Streuung einen großen Wirkungsquerschnitt hat, falls die Nukleonen mit anti-parallem Spin zueinander orientiert sind.

Vergleicht man die Streuung von Neutronen an Neutronen (nn), Neutronen an Protonen (np) und Protonen an Protonen (pp), so bekommt man die



**Abbildung 3.20:** Bei prolaten(oblatten) Atomkernen kann die Rotationsenergie, die durch einen endlichen Drehimpuls  $\vec{R}$  entsteht, einen nennenswerten Beitrag zur Bindungsenergie im Atomkern haben.

selben Wirkungsquerschnitte heraus, wenn man den Beitrag der Coulomb-Wechselwirkung bei der (pp)-Streuung heraus rechnet. D.h. die starke Wechselwirkung hängt nicht von der Ladung ab.

Diese Unabhängigkeit von der Ladung wird mit dem **Isospin-Formalismus** ausgedrückt. Nach dieser Vorstellung sind Proton und Neutron ein und dasselbe Teilchen, das in 2 Varianten vorliegen kann, ähnlich zu den beiden Spineinstellungen eines Elektron mit  $m_s = -1/2$  und  $m_s = 1/2$ . Formal weist man daher den Nukleonen einen sog. Isospin  $T = 1/2$  zu, wobei die Projektion auf eine abstrakte Achse bei Protonen  $T_z = +1/2$  und für Neutronen  $T_z = -1/2$  liefert.

Der Isospin sei auch am Beispiel der sog.  $\pi$ -Mesonen illustriert, die weiter unten beschrieben werden.  $\pi$ -Mesonen können in drei Zuständen vorliegen:  $\pi^+$ ,  $\pi^-$  und  $\pi^0$ . Damit besitzen sie einen Isospin  $T=1$ , der drei Einstellungen haben kann:  $T_z=-1,0,1$ .

## 3.3 Radioaktivität

### 3.3.1 Allgemeines

#### Klassifizierung

Eine große Zahl von Isotopen sind nicht stabil und zerfallen, bis sich schließlich ein stabiles Isotop gebildet hat. Diese instabilen Kerne liegen in einer Auftragung der Neutronenzahl gegenüber der Protonenzahl in unmittelbarer Nachbarschaft der stabilen Kern (schraffierter Bereich in Abb. 3.21).

Man unterscheidet prinzipiell drei mögliche Zerfallsarten, die zu einer Änderung der Nukleonenzahl  $A$ , der Protonenzahl  $Z$  und der Neutronenzahl  $N$  führen (siehe Abb. 3.21):  $\alpha$ -Zerfall ( $A - 4, N - 2, Z - 2$ ),  $\beta^-$ -Zerfall ( $N - 1, Z + 1$ ) und  $\beta^+$ -Zerfall ( $N + 1, Z - 1$ ). Damit ein solcher Zerfallsprozeß ablaufen kann, muß sich die Bindungsenergie pro Nukleon durch den Zerfall erhöhen. D.h. Zerfälle eines spezifischen Isotops ändern die Protonen- und Neutronenzahl immer derart, daß das gebildete Produkt immer näher an dem Bereich der Stabilität liegt. Aus diesem Grund liegen alle  $\beta^+$ ,  $\beta^-$  und  $\alpha$ -Strahler in charakteristischen Bereichen im  $N, Z$ -Diagramm wie in Abb. 3.21 illustriert.

- **$\alpha$ -Strahlung**

Bei der  $\alpha$ -Strahlung wird ein Helium-Kern emittiert. Die Neutronen- und die Protonenzahl im Kern reduziert sich um jeweils 2. Diese Art von Zerfall tritt erst bei schweren Kernen auf, da für die Bildung eines  $\alpha$ -Teilchens der Energiegewinn beim Zerfall eines Kerns (Massenzahl  $A$ ) in einen Kern (Massenzahl  $A-4$ ) groß genug sein muß. Erst bei hoher Protonenzahl wird die Coloumb-Energie nennenswert und die frei werdende Energie beim Zerfall groß.

- **$\beta^-$ -Strahlung**

Bei der  $\beta^-$ -Strahlung wird ein Elektron frei gesetzt. Es entsteht bei der Umwandlung eines Neutrons in ein Proton. Zusätzlich wird ein Anti-Neutrino gebildet:



Bei der  $\beta^-$ -Strahlung erniedrigt sich die Neutronenzahl um 1 und die Protonenzahl erhöht sich um 1. Ein freies Neutron zerfällt direkt mit einer Lebensdauer von  $\sim 880$  s.

- **$\beta^+$ -Strahlung**

Bei der  $\beta^+$ -Strahlung wird ein positives Elektron (Positron) frei gesetzt bei der Umwandlung eines Protons in ein Neutron. Es entsteht zusätzlich ein Neutrino.



Ein freies Proton ist stabil (Wasserstoffatom !). Es wurde versucht die Instabilität eines Protons zu beobachten. Man konnte in diesen Experimenten lediglich die untere Grenze für die Lebensdauer bestimmen mit

$10^{30}$  Jahren. D.h. der  $\beta^+$ -Zerfall findet nur innerhalb eines Atomkerns mit vielen Nukleonen statt.

Alternativ dazu kann auch in einem Atom ein Elektron der Hülle vom Kern eingefangen werden gemäß:



Dieser Einfang eines Hüllen-Elektrons kann nur stattfinden, wenn die Wellenfunktion dieses Elektrons eine endliche Aufenthaltswahrscheinlichkeit am Kernort besitzt. Dies gilt nur für s-Wellenfunktionen. Das Elektron mit der höchsten Einfang-Wahrscheinlichkeit ist ein Elektron der K-Schale. Aus diesem Grund bezeichnet man diese Art des  $\beta^+$ -Zerfalls auch als **K-Einfang**. Bei der  $\beta^+$ -Strahlung erniedrigt sich die Protonenzahl um 1 und die Neutronenzahl erhöht sich um 1.

- **$\gamma$ -Strahlung**

Nach dem  $\alpha$  und  $\beta$ -Zerfall kann zunächst ein angeregter Kern entstehen, ähnlich zu angeregten Atomen. Dieser Atomkern kann in den Grundzustand zurückkehren durch die Emission von Photonen, den  $\gamma$ -Quanten.  $\gamma$ -Strahlung tritt *nie* ohne  $\alpha$ - bzw.  $\beta$ -Strahlung auf.

### Zerfallsgesetz

Eine radioaktive Probe zeichnet sich dadurch aus, daß sie mit der Zeit zerfällt. Die Anzahl an radioaktiven Atomkernen  $N$  ändert sich mit der Zeit wie:

$$\frac{dN}{dt} = -\lambda N = -A(t) \quad (3.63)$$

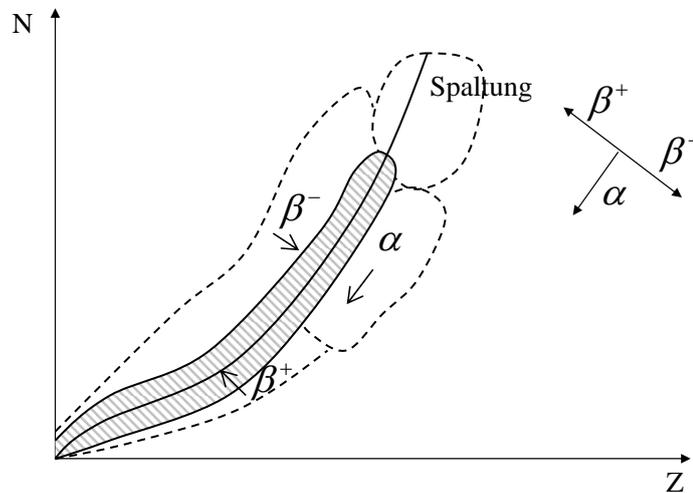
mit  $\lambda$  der **Zerfallskonstante**.  $A$  bezeichnet man als **Aktivität** (Zerfälle pro Sekunde). Löst man die Differentialgleichung 3.63, so bekommt man das Zerfallsgesetz:

$$N(t) = N_0 e^{-\lambda t} = N_0 e^{-\frac{t}{\tau}} \quad (3.64)$$

Die **Halbwertszeit**  $t_{1/2}$  bezeichnet die Zeit, bis zu der nur noch die Hälfte der Atomkerne vorliegt, wenn die **Lebensdauer**  $\tau$  beträgt.

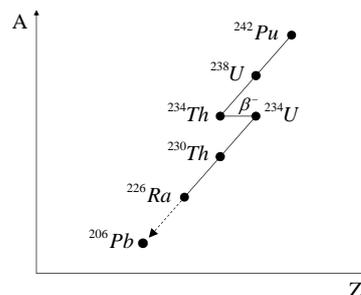
$$t_{1/2} = \tau \ln 2 \quad (3.65)$$

In der Regel tritt Radioaktivität in einer ganzen Zerfallsreihe auf. D.h. ausgehend von einem Element schreiten Zerfallsprozesse soweit fort, bis ein



**Abbildung 3.21:** Je nach Zerfallsart ändert sich die Protonen- bzw. Neutronenzahl in einem Atomkern

stabilen Produkt erreicht wurde. Bei Protonenreichen Kernen führt der  $\alpha$ -Zerfall solange zu einer Erniedrigung der Kernladungszahl  $Z$ , bis ein stabiles Isotop vorliegt. Dies ist am Beispiel des Zerfalls von Plutonium in Abb. 3.22 gezeigt.



**Abbildung 3.22:** Zerfallsreihe von Plutonium

### Maß-Einheiten der Radioaktivität

Radioaktivität wird in unterschiedlichen Maß-Einheiten gemessen. Insbesondere für den Strahlenschutz ist die biologische Wirksamkeit der einzelnen Strahlungsarten entscheidend

- **Aktivität**

Die Aktivität bezeichnet die Zerfälle pro Sekunde. Sie wird in **Becquerel Bq** gemessen. Die ältere Einheit sind Curie wobei  $1 \text{ Curie} = 3.7 \cdot 10^{10} \text{ Bq}$  sind.

$$\text{Aktivität} = [\text{Becquerel}] \text{ Zerfälle pro Sekunde}$$

- **Energiefluß**

Für viele Anwendungen ist nicht nur die Zerfallsrate, sondern die Energie relevant, die durch einen radioaktiven Zerfall in einer Probe deponiert wird ( $\alpha$ -Teilchen werden in Gewebe abgebremst und deponieren dort ihre Energie). Dies bezeichnet man als **Dosis D**, die in **Gray Gy** gemessen wird.  $1 \text{ Gy} = 1 \text{ Jkg}^{-1}$  (deponierte Energie pro Kilogramm der Probe).

$$\text{Dosis} = [\text{Gray}=\text{Jkg}^{-1}] \text{ deponierte Energie pro Kilogramm Probe}$$

- **biologische Wirkung**

Die biologische Wirkung der einzelnen Strahlungsarten ergibt sich aus der Zahl an Defekten, die ein Projektil in einer Zelle erzeugen kann. Hierzu benutzt man einen Gewichtungsfaktor  $Q$ , der für  $\gamma$ -Quanten und Elektronen  $Q = 1$  ist, für Neutronen und  $Q = 2..3$  für leichte Ionen und Protonen  $Q = 10$  und für schnelle  $\alpha$ -Teilchen  $Q = 20$ . Aus der Dosis  $D$  und dem Gewichtungsfaktor  $Q$  ergibt sich die **Äquivalenzdosis H**.

$$H = QD \tag{3.66}$$

Diese wird in **Sievert Sv** gemessen. Die frühere Einheit war **rem** (radioactivity equivalent man), wobei  $1 \text{ rem} = 0.01 \text{ Sv}$  sind. Die mittlere Strahlenbelastung in Deutschland durch die natürliche Radioaktivität sind  $2 \text{ mSv}$  pro Jahr. Ein Röntgenaufnahme entspricht auch ungefähr einer Strahlenbelastung von  $2 \text{ mSv}$ .

$$\text{Äquivalenzdosis} = [\text{Sievert Sv} = \text{Jkg}^{-1}] \text{biologische Schädigung durch eine gegebene Dosis}$$

### 3.3.2 $\alpha$ -Zerfall

Beim  $\alpha$ -Zerfall wird ein Heliumkern emittiert. D.h. ein Nukleon mit Nukleonenzahl  $A$ , zerfällt in einen  $A - 4$ -Kern und ein  $A=4$  Heliumkern. Durch diesen Prozeß können insbesondere schwere protonen-reiche Kerne ihre Energie erniedrigen. Die frei werdende Energie bezeichnet man auch als **Wärmetönung**  $Q$  der Reaktion. Stellt man eine Energiebilanz auf für  $E(A)$  und  $E(A-4)+E(4)$ , so stellt man fest, daß die Bindungsenergie pro Nukleon in einem Heliumkern (gg-Kern) besonders hoch ist. D.h. von der frei werdenden Wärmetönung muß nur ein geringer Teil für die Bildung des Helium-Kerns aufgebracht werden und ein großer Teil wandelt sich in kinetische Energie um. Damit entsteht zunächst ein Heliumkern *innerhalb* des Kerns, dessen Zustand energetisch oberhalb des Vakuumniveaus liegt. Dies ist Voraussetzung für den Zerfall, wie in Abb. 3.23 verdeutlicht ist.

Bei der Untersuchung des  $\alpha$ -Zerfalls macht man die Beobachtung, daß die Zerfallskonstante  $\lambda$  mit der Reichweite der  $\alpha$ -Teilchen in einem Medium skaliert wie:

$$\log \lambda = A + B \log R_\alpha \quad (3.67)$$

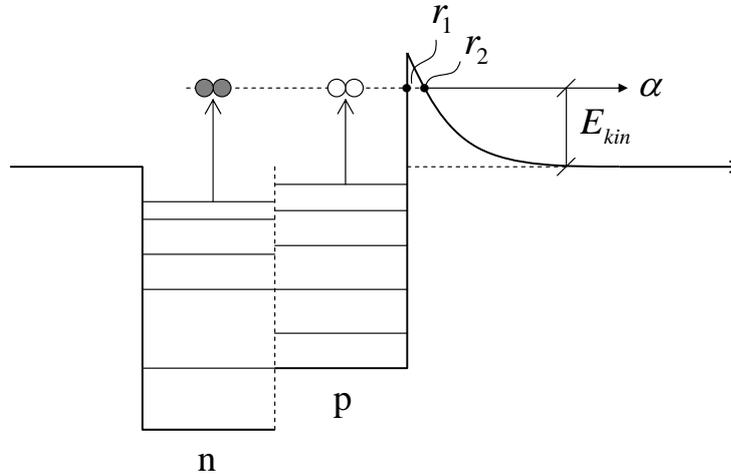
Dies bezeichnet man als **Geiger-Nuttal-Regel**. Zusätzlich stellt man fest, daß die Reichweite bei allen Zerfällen gleich ist. Nachdem die Reichweite  $R_\alpha \propto E^{3/2}$  skaliert (siehe unten), ist die Energie der entstehenden  $\alpha$ -Teilchen immer gleich. Diese Beobachtung lassen sich einfach erklären.

Betrachten wir die Nukleonen in einem Atomkern. Mit einer Wahrscheinlichkeit  $W_0$  bildet sich spontan ein Heliumkern im Inneren. Dieser bewegt sich frei im Potentialtopf des Atomkerns und trifft mit einer Frequenz  $W_1$  auf die Wand des einschließenden Potentials. Diese Frequenz läßt sich aus der Ausdehnung des Kerns (fm) und der Geschwindigkeit des Heliumkerns (entsprechend der kinetischen Energie) ableiten.

Bei jedem Auftreffen hat der Heliumkern eine endliche Wahrscheinlichkeit durch die Coloumb-Barriere zu *tunneln*. Diese Transmissions-Wahrscheinlichkeit  $T$  berechnet sich aus:

$$T = T_0 e^{-\frac{2}{\hbar} \int_{r_1}^{r_2} \sqrt{2m(E_{pot}(r)-E)} dr} = T_0 e^{-G} \quad (3.68)$$

mit  $r_1$  dem Rand des Atomkerns, und  $r_2$  dem Abstand, an dem der Heliumkern den repulsiven Teil des Coloumb-Potentials erreicht (siehe Abb. 3.23). Den Exponenten im Exponential-Term bezeichnet man als **Gamow-Faktor**  $G$ :



**Abbildung 3.23:** Beim  $\alpha$ -Zerfall wird im Atomkern ein Heliumkern gebildet, dessen kinetische Energie so groß ist, daß er auf der Energieskala oberhalb der Vakuumniveaus liegt. Durch Tunneln durch die Coloumb-Barriere kann der Heliumkern den Bereich der starken Wechselwirkung verlassen.

$$G = \frac{2\sqrt{2m}}{\hbar} \int_{r_1}^{r_2} \sqrt{\left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0 r} - E\right)} dr \quad (3.69)$$

Schließlich bekommt man die Zerfallskonstante (= Lebensdauer<sup>-1</sup>) aus dem Produkt der Bildungswahrscheinlichkeit  $W_0$ , der Auftrefferate  $W_1$  und der Transmissionswahrscheinlichkeit  $T$  zu:

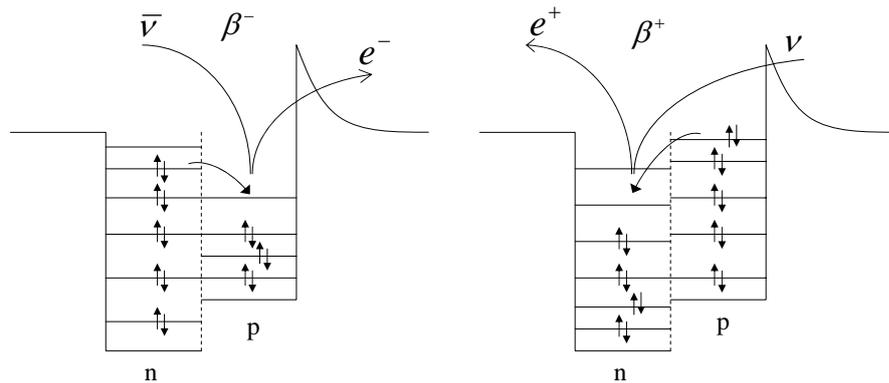
$$\frac{1}{\tau} = W_0 W_1 T \quad (3.70)$$

Der eindeutige Zusammenhang zwischen Lebensdauer und Rate ergibt sich jetzt wie folgt. Der dominante Beitrag zur Variation der Lebensdauer ist die Transmissionswahrscheinlichkeit  $T$ . Bei einer langen Lebensdauer ist die Transmissionswahrscheinlichkeit gering. Die Breite der Tunnelbarriere ist groß, falls die Anregungsenergie im Kern zur Bildung eines Heliumkerns gering ist. Da beim *elastischen* Tunneln die kinetische Energie des Teilchens erhalten bleibt, ist die kinetische Energie des ausgesendeten Heliumkerns entsprechend gering und deren Reichweite klein.

Die erfolgreiche Beschreibung des  $\alpha$ -Zerfalls als das Tunneln durch eine Coloumb-Barriere war eine frühe Bestätigung der Quantenmechanik und des Tunneleffektes.

### 3.3.3 $\beta$ -Zerfall

Beim  $\beta$ -Zerfall wandelt sich ein Neutron/Proton *innerhalb* des Atomkerns in ein Proton/Neutron um. Dies ist nur energetisch günstig, wenn ein entsprechender Neutronen- bzw. Protonen-Überschuß existiert, wie in Abb. 3.24 illustriert.



**Abbildung 3.24:**  $\beta$ -Zerfall tritt nur auf, falls die Umwandlung eines Neutron/Protons in ein Proton/Neutron energetisch günstig ist.

### Energiespektrum

Beim  $\beta$ -Zerfall beobachtet man Elektronen als Reaktionsprodukte. Im Unterschied zum  $\alpha$ -Zerfall stellt man allerdings fest, daß die Elektronen *nicht* mono-energetisch sind, sondern eine breite Energieverteilung haben.

Betrachtet man die Kinematik des Zerfalls eines Neutrons:

$$n \rightarrow p + e^- \quad (3.71)$$

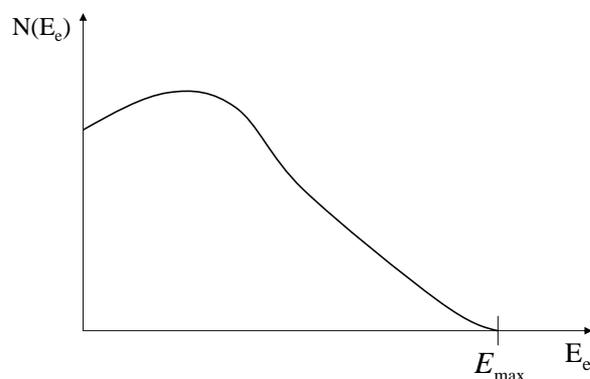
so hat das Proton nach dem Zerfall eine kinetische Energie von

$$E_p = \frac{p_p^2}{2m_p} \quad (3.72)$$

bzw. das Elektron eine kinetische Energie von

$$E_{e^-} = \frac{p_e^2}{2m_e} \quad (3.73)$$

Daraus folgt:



**Abbildung 3.25:** Beim  $\beta$ -Zerfall beobachtet man ein kontinuierliches Spektrum an Elektronenenergien.

$$\frac{E_p}{E_e} = \frac{m_e}{m_p} \quad (3.74)$$

Die kinetische Energie in den Reaktionsprodukten muß gleich der freigesetzten Gesamtenergie  $E_0$  sein:

$$E_p + E_e = E_0 \quad (3.75)$$

Damit wird die kinetische Energie des Elektrons zu:

$$E_e = \frac{m_p}{m_e + m_p} E_0 \quad (3.76)$$

D.h. bei gegebener freigesetzter Energie  $E_0$  des Zerfalls, sollte das Elektron eine *feste* Energie haben, die aufgrund des Massenverhältnis zwischen Proton und Elektron fast  $E_0$  beträgt. Diese konstante Elektronen-Energie wird *nicht* beobachtet. Vielmehr beobachtet man eine Verteilung bis zu einer maximalen Energie  $E_{max} = E_0$ , wie in Abb. 3.25 verdeutlicht ist.

Diese Beobachtung wurde von Pauli 1930 aufgelöst, indem er das **Neutrino**<sup>8</sup> postuliert hat, das für die Energie- und Impulserhaltung sorgt und gleichzeitig erlaubt, daß die kinetische Energie des Elektrons eine kontinuierliche Verteilung hat. Nachweisen konnte man das Neutrino erst viele Jahre später, 1956.

Die vollständige Formulierung des  $\beta$ -Zerfalls lautet demnach:

---

<sup>8</sup>Ursprünglich hatte Pauli das Teilchen Neutron getauft, was nachfolgend aber für das neutrale Nukleon selbst verwendet wurde.

$$n \rightarrow p + e^- + \bar{\nu} \quad (3.77)$$

mit  $\bar{\nu}$  dem Antineutrino<sup>9</sup>. Wie ergibt sich jetzt die Energieverteilung der Elektronen aus dem  $\beta$ -Zerfall. Die Wahrscheinlichkeit  $p(E_e)$ , ein Elektron im Energie-Intervall  $dE_e$  zu finden, ist:

$$p(E_e)dp_e \propto g_e(E_e)g_{\bar{\nu}}(E_{\nu})W_{Abregung}dp_e \quad (3.78)$$

mit  $g_e(E_e)$  der Zustandsdichte der Elektronen,  $g(E_{\nu})$  der Zustandsdichte der Anti-Neutrinos und  $W_{Abregung}$  der Zerfallsrate. Da Elektron und Neutrino sehr viel leichter als das Proton sind, betrachten wir die Aufteilung der Gesamtenergie  $E_0$  in die kinetische Energie des Elektrons und des Neutrinos<sup>10</sup>

$$E_0 = E_e + E_{\bar{\nu}} \quad (3.79)$$

Die Zustandsdichte  $g_e(E_e)$  bezeichnet die Zahl der Elektronen im Impuls-Intervall  $dp_e$ :

$$g_e(E_e) = \frac{dN_e}{dp_e} \propto p_e^2 \quad (3.80)$$

Ebenso die Zahl der Anti-Neutrinos  $dN_{\bar{\nu}}(E_e)$  im Impulsintervall  $dp_{\bar{\nu}}$

$$\frac{dN_{\bar{\nu}}}{dp_{\bar{\nu}}} \propto p_{\bar{\nu}}^2 \quad (3.81)$$

Allgemein gilt die Energie-Impuls-Beziehung für relativistische Teilchen:

$$E = \sqrt{p^2c^2 + (mc^2)^2} \quad (3.82)$$

Neutrinos haben eine verschwindende Ruhe-Masse im Vergleich zu den Elektronen. Ihre Geschwindigkeit ist nahezu Lichtgeschwindigkeit. Deshalb gilt für Neutrinos die Energie-Impuls-Beziehung:

$$E_{\bar{\nu}} = cp_{\bar{\nu}} = E_0 - E_e \quad (3.83)$$

Damit wird die Wahrscheinlichkeit ein Elektron im Impulsintervall  $dp_e$  zu finden:

$$p(E_e)dp_e \propto p_e^2(E_0 - E_e)^2W_{Abregung}dp_e \quad (3.84)$$

<sup>9</sup>In dieser Gleichung muß das Anti-Neutrino auf der rechten Seite auftauchen, da für Kernreaktionen die Leptonenzahl erhalten bleiben muß. Teilchen der Leptonen (Elektronen, Neutrino, Myon) haben eine Leptonenzahl  $L=1$  und Anti-Teilchen die Leptonenzahl  $L=-1$ .

<sup>10</sup>Der Anteil des Protons an der kinetischen Energie ist vernachlässigbar.

Dieser Zusammenhang läßt sich auch in Abhängigkeit von der kinetischen energie der Elektronen schreiben. Die gesamte Energie (kinet. Energie + Ruhemasse) des Elektrons ist in relativistischer Beschreibung:

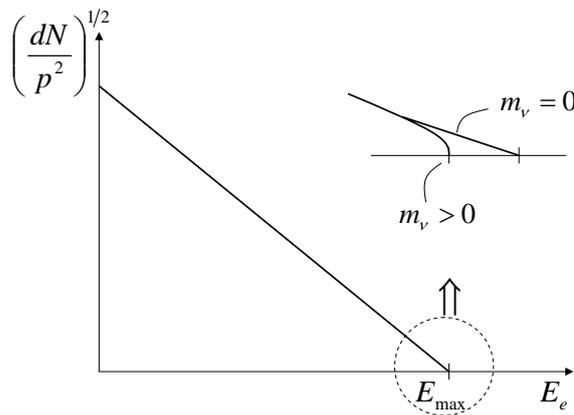
$$E = \sqrt{p_e^2 c^2 + (m_e c^2)^2} = E_e + m_e c^2 \quad (3.85)$$

Der Elektronenimpuls ist

$$p_e = \frac{1}{c} \left[ (E_e + m_e c^2)^2 - (m_e c^2)^2 \right]^{1/2} \quad (3.86)$$

Diese Ergebnisse lassen sich zusammenfassen zu:

$$p(E_e) dE_e \propto W_{\text{Abregung}} (E_0 - E_e)^2 \sqrt{E_e^2 - m_e^2 c^4} E_e dE_e \quad (3.87)$$



**Abbildung 3.26:**  $\beta$ -Endpunkt-Spektroskopie.

Trägt man die Größe  $[p(E_e)/(p_e^2)]^{1/2}$  als Funktion von  $E_e$  auf, so erhält man eine Gerade. Die maximale Energie  $E_{max} = E_0$  entspricht einem Zerfall, bei dem die gesamte kinetische Energie auf das Elektron übertragen wurde.

In der bisherigen Betrachtung wurde das Anti-Neutrino (bzw. Neutrino) als sehr massearmes Teilchen mit einer Geschwindigkeit nahe der Lichtgeschwindigkeit angenommen (siehe Gl. 3.83). Falls das Neutrino eine Masse besitzt, wird dies besonders deutlich sichtbar am Ende des Elektronen-Energie-Spektrums: bei  $E_{e,max}$  wird die gesamte Energie  $E_0$  für die kinetische Energie des Elektrons aufgewendet. Falls das Neutrino keine Masse hat, muß für dessen Erzeugung noch die Ruheenergie aufgewendet werden, dieser kleine Betrag fehlt dann der kinetischen Energie des Elektrons. D.h. bei endlicher Neutrino-Masse, sollte man eine Abweichung von der geraden

in Abb. 3.26 bei  $E_{e,max}$  beobachten. Diese Experimente bezeichnet man als  **$\beta$ -Endpunkt-Spektroskopie**, in denen es allerdings nur gelungen ist, eine obere Grenze für die Ruhemasse des Neutrinos von ca. 3eV zu messen.

Der experimentelle Nachweis von Neutrinos ist zum ersten mal 1956 durch Reines und Cowan gelungen. Durch  $\beta$ -Zerfälle in einem Kernreaktor entsteht ein hoher Fluß an Neutrinos bzw. Anti-Neutrinos. Diese werden auf einen Tank mit Cadmiumchlorid gelöst in Wasser ( $H_2O:CdCl_2$ ) gelenkt (siehe Abb. 3.27). Bei dem Einfang eines Anti-Neutrinos durch ein Proton im Wasser erfolgt die Reaktion:



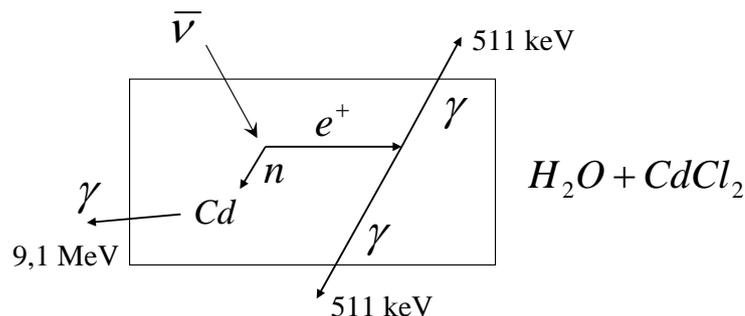
Die Zahl der Ereignisse ist sehr gering. Der Wirkungsquerschnitt für die Absorption eines Neutrinos ist nur  $\sigma_{Neutrino-Einfang} \sim 10^{-43..45} cm^2$ . Das entstandene Neutron kann von einem Cadmium-Kern eingefangen werden. Der angeregter  $Cd^*$  Kern zerfällt weiter gemäß:



Mit einem Detektor weist man diese  $\gamma$ -Quanten bei einer Energie von 9.1 MeV nach. Falls *gleichzeitig* (= **koinzident**) das entstehende Positron mit einem Elektron zerstrahlt unter Emission von 2  $\gamma$ -Quanten der Energie 511 keV



so kann man schließen, daß die Reaktion 3.88 abgelaufen sein muß.



**Abbildung 3.27:** Neutrino-Nachweis durch den Einfang eines Anti-Neutrinos durch ein Proton in  $H_2O$ .

### Isobarenregeln

Mit Hilfe des  $\beta$ -Zerfalls läßt sich auch die Stabilität der einzelnen gg-, uu- bzw. gu/ug-Kerne ableiten. Ein  $\beta$ -Zerfall kann prinzipiell dann stattfinden, wenn die Energie des Systems sich durch die Umwandlung eines Protons in ein Neutron bzw. umgekehrt erniedrigt. D.h. neutronen-reiche Kerne sind  $\beta^-$ -Strahler, da bei der Umwandlung eines Neutrons in ein Proton der entsprechende Zustand im Fermi-See der Protonen *unbesetzt* ist. D.h. für einen  $\beta$ -Zerfall benötigt man eine *Ungleichverteilung* zwischen Neutronen- und Protonenzahl. Dieser Term wurde durch die Asymmetrie-Energie im Tröpfchenmodell ausgedrückt. Diese Korrektur ist:

$$\Delta E_{\text{Asymmetrie}} = -a_F (Z - A/2)^2 \frac{1}{4A} \quad (3.91)$$

d.h. man erhält eine Parabel für  $-\Delta E$  mit einem Minimum bei  $Z_0 = A/2$ . Betrachten wir zunächst Kerne mit gerader Nukleonenzahl, d.h. entweder uu- oder gg-Kerne. Diese Parabel ist unterschiedlich für gg- und uu-Kerne, da die Paarungs-Energie berücksichtigt werden muß, die für uu-Kerne ungünstiger ist:

$$\Delta E_{\text{Paarung}} = -a_p A^{-1/2} \delta \quad (3.92)$$

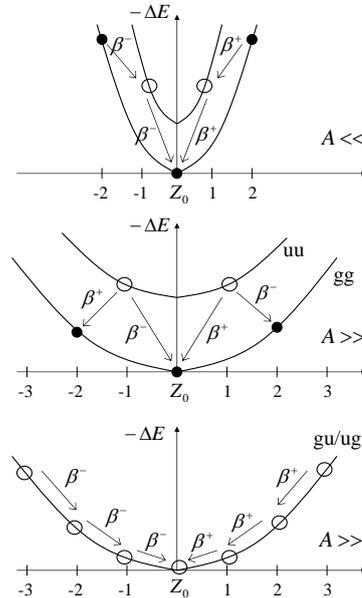
Dies ist in Abb. 3.28 illustriert. Bei einem  $\beta^-$  Zerfall wandelt sich ein Neutron in ein Proton um, d.h. ein uu-Kern wandelt sich z.B. in einen gg-Kern oder ein gg-Kern in einen uu-Kern um. Aus der Abb. 3.28 erkennt man sofort, daß sich ein uu-Kern immer in einen energetisch günstigeren gg-Kern umwandeln kann. Daraus leitet sich die **erste Mattau'sche Isobaren-Regel** ab, die besagt:

**Für Kerne mit gerader Nukleonenzahl kann es keine stabilen uu-Kerne geben aber mehrere stabile gg-Kerne**

Bei sehr leichten Elementen mit kleinem  $A$  ist die Krümmung der Parabel sehr groß (wegen  $Z_0^2/A$  in Gl. 3.91) und ein gg-Kern kann sich auch in einen uu-Kern umwandeln. Dann gibt es nur noch ein stabiles Isobar.

Für Kerne mit ungerader Nukleonenzahl d.h. entweder gu- oder ug-Kerne erhält man eine einzige Parabel. Beim  $\beta$ -Zerfall wandelt sich ein gu-Kern in einen ug-Kern um bzw. umgekehrt. Aus der Abb. 3.28 erkennt man sofort, daß nur ein Isobar stabil sein kann. Damit ergibt sich die **zweite Mattau'sche Isobaren-Regel**, die besagt:

**Für Kerne mit ungerader Nukleonenzahl kann es nur ein stabiles Isobar geben.**



**Abbildung 3.28:** Nach den Mattau'schen Isobaren-Regeln kann es für gg-Kerne mehrere stabile Isobare geben; für ug/gu-Kerne - nur eines.

### Paritätsverletzung beim $\beta$ -Zerfall

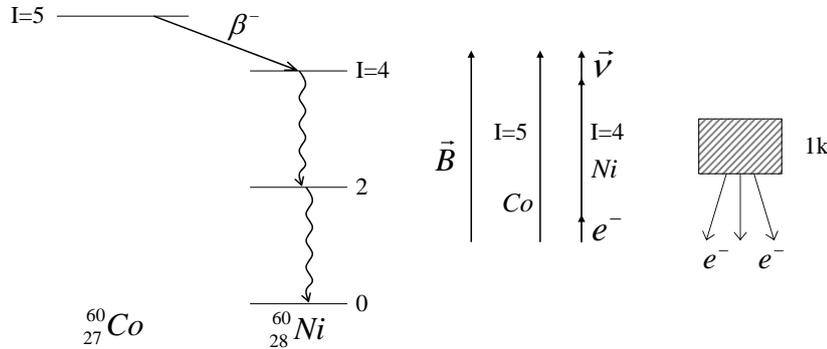
Bei dem  $\beta$ -Zerfall wurde die Beobachtung gemacht, daß der Impuls und der Spin von Elektron und Neutrino, die emittiert wurden, jeweils in die entgegengesetzte Richtung zeigt. Bei Positronen und Anti-Neutrinos zeigen Impuls und Spin in die gleiche Richtung. D.h. die Teilchen besitzen eine **Helizität**: Teilchen linkshändig und Anti-Teilchen rechtshändig.

Dies wurde als erstes in dem **Wu-Experiment** beobachtet. Man betrachtet den  $\beta$ -Zerfall eines  ${}^{60}_{27}\text{Co}$ -Kerns. Dieser hat im Grundzustand einen Kernspin  $I = 5$  und zerfällt mit einer Halbwertszeit von  $\sim 5$  Jahren in einen Nickel-Kern  ${}^{60}_{28}\text{Ni}$ . Dieser angeregte Nickelkern hat einen Kernspin  $I = 4$ .



Die Kobaltprobe befindet sich in einem starken Magnetfeld und ist auf 1 K abgekühlt, um für eine Polarisation der Kernspins zu sorgen. Wegen der Ausrichtung des Kernspins des Kobaltkerns zeigen die Spins des erzeugten Elektrons und des erzeugten Anti-Neutrinos in dieselbe Richtung (siehe Abb. 3.29).

Falls die Spin-Richtung des Elektrons unabhängig von der Richtung des Impulses ist, sollte man bei einer Messung der Winkelverteilung der emit-



**Abbildung 3.29:** Im Wu-Experiment beobachtet man eine Asymmetrie der Elektronenemission. D.h. die Teilchen, die bei der schwachen Wechselwirkung erzeugt werden, besitzen eine Helizität (Impuls und Spin in entgegengesetzte Richtung bei Teilchen und in dieselbe Richtung bei Anti-Teilchen).

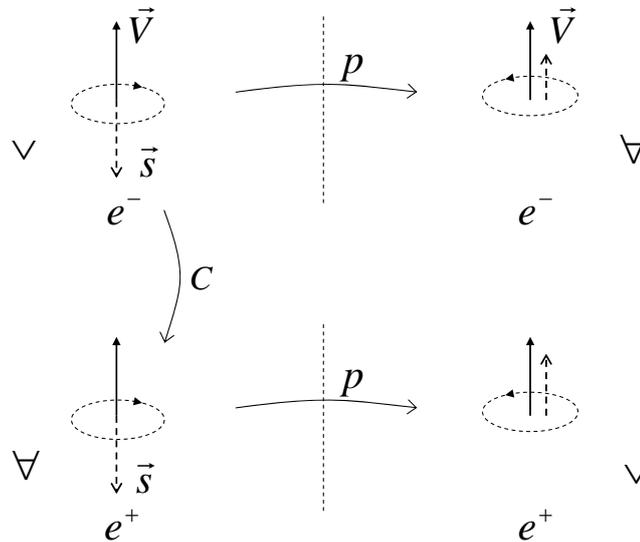
tierten Elektronen das gleiche Signal in alle Richtungen beobachten. Dies ist allerdings nicht der Fall. Man beobachtet mehr Elektronen, die entgegengesetzt zur Magnetfeldrichtung emittiert werden. D.h. Spin und Impuls des Elektrons sind in die entgegengesetzte Richtung orientiert. Diese Vorzugsrichtung bezeichnet man als eine Verletzung der **Parität** oder P-Verletzung. Bei der Parität vergleicht man das Ergebnis eines Experimentes und dessen Spiegelbild, einen linkshändigen Prozess mit bei Spiegelung zu einem rechtshändigen Vorgang. Da man keine rechtshändigen Elektronen beim  $\beta$ -Zerfall beobachtet, ist die Parität verletzt.

Eine ähnliche Betrachtung kann man anstellen für den Austausch der Ladung (*C* Charge). Betrachtet man ein linkshändiges Elektron und tauscht es gegen ein Positron aus, so tritt auch C-Verletzung auf, da ein linkshändiges Positron beim  $\beta$ -Zerfall nicht gebildet wird.

Erst wenn man die Parität *P* und die Ladung *C* ändert, d.h. ein linkshändiges Elektron gegen ein rechtshändiges Positron austauscht, so erhält man wieder einen existierenden Zustand. Man spricht von **CP-Invarianz**<sup>11</sup>.

Bei der Paritäts-Verletzung spricht man von einer spontanen Symmetriebrechung der schwachen Wechselwirkung, da in der Natur nur eine Sorte von Helizität für Teilchen vorkommt.

<sup>11</sup>Dies gilt nicht allgemein für die schwache Wechselwirkung, da man beim Zerfall von K-Mesonen auch direkt die CP-Verletzung beobachtet hat.



**Abbildung 3.30:** Der  $\beta$ -Zerfall besitzt  $C$ - sowie  $P$ -Verletzung. Er bleibt allerdings invariant bei gleichzeitiger Ladungs- und Paritätsänderung.

### 3.3.4 $\gamma$ -Zerfall

Bei  $\alpha$ - und  $\beta$ -Zerfall kann als Endprodukt ein angeregter Kern entstehen. Dieser kann sich Abregen durch Emission von Photonen, den  $\gamma$ -Quanten. D.h. der  $\gamma$ -Zerfall tritt immer nur in Zusammenhang mit dem  $\alpha$ - oder  $\beta$ -Zerfall auf.

### Multipol-Übergänge

Nachdem Kerne eine stark asymmetrische Ladungsverteilung besitzen, tragen höhere Momente signifikant zu der Winkelverteilung der emittierten Strahlung bei. In der Multipol-Entwicklung der Ladungsverteilung im Kern bekommt man alle Anteile der magnetischen und elektrischen Dipol/Quadrupol etc. -Strahlung. Bei einem elektrischen Dipol schwingt zunächst ein elektrisches Feld in Richtung des Dipolmoments, bei einem magnetischen Dipol schwingt zunächst ein magnetisches Feld in Richtung des Dipolmoments. Dies ist in Abb. 3.31 veranschaulicht.

Je nach Art des Übergangs im Atomkern bekommt man Dipol-, Oktupol-Strahlung etc, die jeweils mit E1, E2, E3 für elektrische und mit M1, M2, M3... für magnetische Multipolstrahlung ausgedrückt wird. Je nach der Ordnung der Strahlung ändert sich die Parität  $\Pi$ , d.h. die Symmetrie der Wel-

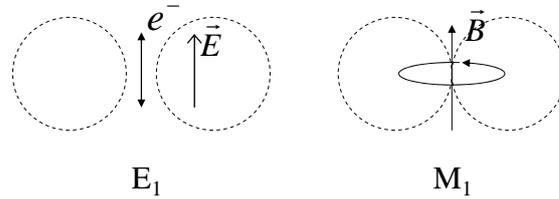


Abbildung 3.31: Elektrische und magnetische Dipolstrahlung E1 und M1.

$\Delta I$	Symbol	Paritätsänderung ?
0	E1	ja
	M1,E2	nein
1	E1	ja
	M1,E2	nein
2	M2,E3	ja
	E2	nein
3	E3	ja
	M3,E4	nein

Tabelle 3.3: Multipolstrahlung beim  $\gamma$ -Zerfall

lenfunktion des Kerns<sup>12</sup>:

$$El \quad \Pi = (-1)^l \tag{3.94}$$

$$Ml \quad \Pi = (-1)^{l+1} \tag{3.95}$$

Die Emission der Strahlung ist mit einer Änderung des Drehimpulses des Kerns verbunden. Wenn man nur den Betrag von  $\vec{I}$  betrachtet, kann es auch Übergänge mit  $\Delta I = 0$  geben, falls sich nur die Richtung von  $\vec{I}$  ändert. Die möglichen Übergänge mit entsprechender Notation sind in Tab. 3.3 gezeigt.

Die  $\gamma$ -Zerfälle mit niedriger Ordnung der Multipolstrahlung haben sehr viel größere Übergangs-Wahrscheinlichkeiten und dem entsprechend kürzere Lebensdauern. Eine hohe Übergangs-Wahrscheinlichkeit ergibt sich immer bei einem hohen Überlapp der Wellenfunktionen im Ausgangs- und im Endzustand (Fermi's goldene Regel). Bei Multipolstrahlung höherer Ordnung sind die entsprechenden Wellenfunktionen der beteiligten Zustände räumlich stark unterschiedlich. Es ergeben sich kleine Übergangswahrscheinlichkeiten

<sup>12</sup>Gerade Parität bedeutet, daß die Wellenfunktion des Kerns bei einer Spiegelung am Koordinatenursprung erhalten bleibt. Eine s-Wellenfunktion besitzt gerade Parität, eine p-Wellenfunktion besitzt ungerade Parität

und hohe Lebensdauern. Je nach Änderung des Drehimpulses  $\Delta I$  bekommt man typische Werte für die Lebensdauern von  $\Delta I = 0 : 10^{-15}\text{s}$ ,  $\Delta I = 1 : 10^{-6}\text{s}$ ,  $\Delta I = 2 : 10^{-5}\text{s}$  und  $\Delta I = 3 : 1\text{s}$ .

### $\gamma\gamma$ -Winkelkorrelation

Der  $\gamma$ -Zerfall kann auch als Sonde zur Untersuchung eines Festkörpers verwendet werden. Hierzu implantiert man ein radioaktives Präparat in dem zu untersuchenden Festkörper. Ein System ist zum Beispiel das Element  $^{60}\text{Co}$ , das im Grundzustand ein Drehimpuls  $I = 5$  besitzt. Dies kann über die schwache Wechselwirkung zu einem angeregten Nickelkern zerfallen mit Drehimpuls  $I = 4$ . Dies zerfällt in den Grundzustand  $I = 0$  über die Emission von zwei  $\gamma$ -Quanten. Der Übergang ist ein E2 Übergang, d.h. elektrische Quadrupolstrahlung. Wenn man einen einzelnen Kern betrachtet, erfolgt die Emission des  $\gamma$ -Quants in die jeweilige Richtung mit unterschiedlicher Wahrscheinlichkeit entsprechend dem Emissionsprofil der Quadrupolstrahlung. In der Probe sind die Orientierungen der Kerne statistisch verteilt, so daß man in jede Richtung gleich viele  $\gamma$ -Quanten beobachtet. Wenn man allerdings *zwei*  $\gamma$ -Quanten nahezu gleichzeitig (koinzident) beobachtet, können die nur von einem und demselben Kern ausgesandt worden sein. Wenn man zwei Detektoren verwendet, besteht eine Korrelation zwischen den Signalen, da zwei Richtungen des Quadrupolfeldes *gleichzeitig* beobachtet werden, das erste  $\gamma$ -Quant gibt Information über die absolute Orientierung des Kerns, und das zweite "tastet" das Emissionsprofil der Quadrupolstrahlung ab.

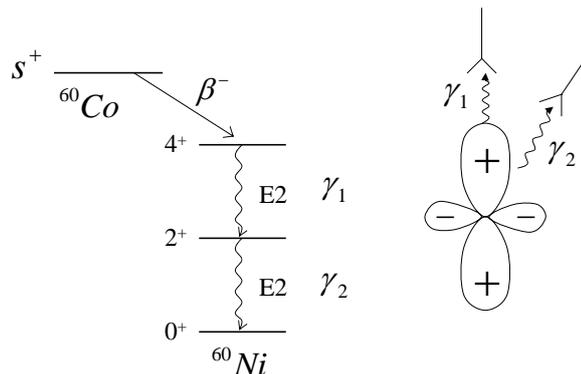


Abbildung 3.32:  $\gamma\gamma$ -Winkelkorrelation.

In solch einer **Koinzidenz-Messung** beobachtet man somit Korrelationen der Signale, die sich auf die Emissionsverteilung der Quadrupolstrahlung

zurück rechnen lassen. Diese Koinzidenz setzt allerdings voraus, daß der Kern im Zustand  $I = 2$  seine Orientierung nicht ändert, da nur dann die strenge Korrelation zwischen den beiden  $\gamma$ -Quanten herrscht. Befindet sich in der Probe zum Beispiel ein internes Magnetfeld, kann sich die Orientierung des Nickelkern durch die Präzession während der Lebensdauer  $\tau_{I=2}$  ändern und die Korrelation verschwindet. D.h. das Messsignal der "Güte der Korrelation" gibt Aufschluss über die Existenz und Stärke eines lokalen internen Magnetfeldes.

### Positronen-Emissions-Tomografie

Eine andere Anwendung von  $\gamma$ -Quanten ist die Positronen-Emissions-Tomografie. Hier wird zunächst ein  $\beta^+$ -Strahler in das zu untersuchende Objekt eingebracht. Dieser zerfällt unter Emission von Positronen. Diese haben als Anti-Teilchen nur eine begrenzte Reichweite, da sie sofort mit einem Elektron in der Probe rekombinieren. Dabei zerstrahlen sie vollständig unter Umwandlung der Ruhmassen von Elektron und Positron (jeweils 511 keV) in zwei  $\gamma$ -Quanten, die wegen der Impulserhaltung unter  $180^\circ$  auseinander fliegen. Der Koinzidenz-Nachweis von zwei 511 keV  $\gamma$ -Quanten unter  $180^\circ$  ist somit ein Nachweis für das Zerstrahlen eines Positrons, wie in Abb. 3.33 verdeutlicht ist. Diese Positronen-Zerstrahlung hängt von der lokalen Elektronendichte ab. D.h. der Kontrast in der Methode entsteht durch die Dichtevariation des Festkörpers.

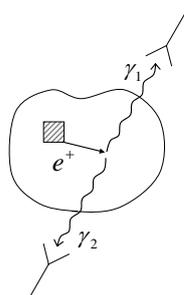


Abbildung 3.33: PET Positronen-Emissions-Tomografie.

## 3.4 Experimentelle Methoden der Kernphysik

Bei der Untersuchung von Atomkernen werden vielfach hochenergetische Teilchen gestreut. Über die Winkelverteilung der gestreuten Teilchen schließt man auf die innere Struktur der Kerne.

In einem Stoßprozeß hochenergetischer Teilchen kann die Relativ-Energie  $E_0$  in die Erzeugung (wegen  $E = mc^2$ ) neuer Teilchen umgesetzt werden, falls  $E_0/c^2$  die Ruhemasse des zu erzeugenden Teilchens übersteigt. Um diese Energien im Labor zu erzeugen sind ausgefeilte Beschleunigungs-Techniken notwendig.

### 3.4.1 Allgemeines

Bei der Beschleunigung von Teilchen auf hohe Energien kommt man in den Bereich relativistischer Geschwindigkeiten. Nähert sich die Teilchengeschwindigkeit der Lichtgeschwindigkeit, so erhöht sich bei weiterer Beschleunigung dessen Energie und Masse. Die relativistische Gesamtenergie ist:

$$E = E_{kin} + E_0 = \sqrt{(cp)^2 + (m_0c^2)^2} \quad (3.96)$$

Mit der Ruheenergie  $E_0$ :

$$E_0 = m_0c^2 = \sqrt{E^2 - (cp)^2} \quad (3.97)$$

und der kinetischen Energie

$$E_{kin} = E - m_0c^2 = \sqrt{(cp)^2 + (m_0c^2)^2} - m_0c^2 \quad (3.98)$$

Mit  $E_{kin} = (m - m_0)c^2$  bekommt man die **relativistische Massenzunahme** zu:

$$\boxed{m = m_0 \frac{1}{\sqrt{1 - \beta^2}} \quad \beta = \frac{v}{c}} \quad (3.99)$$

### 3.4.2 Potential-Beschleuniger

Bei einem Potential-Beschleuniger durchläuft ein geladenes Teilchen ein elektrisches Feld. Die hierfür notwendigen Spannungen werden entweder mittels eines Bandgenerators erzeugt, dem **van-de-Graaf Beschleuniger**, oder über eine **Kaskaden-Schaltung** realisiert.

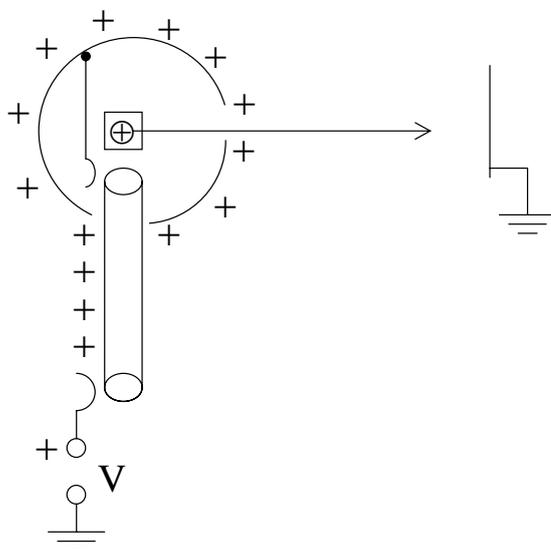


Abbildung 3.34: van-de-Graaf Beschleuniger.

Bei einem **van-der-Graaf Beschleuniger** wird Ladung auf ein isolierendes Band gesprüht. Diese positive Ladung wird über einen Abnehmer im Inneren einer Hohlkugel abgenommen. Diese Ladung fließt ab und sammelt sich auf der Oberfläche der Kugel an. Im Innern dieser Kugel befindet sich die Ionenquelle. Aus dieser Quelle werden positive Ionen extrahiert und in dem elektrischen Feld zwischen Kugel und Target beschleunigt. Der Bandgenerator liefert eine sehr gleichmäßige Spannung, allerdings sind die Ladungsmenge und damit die Ionenströme, die realisiert werden können, gering.

Bei der **Kaskaden-Schaltung** wird über einen Transformator ein Wechselfeld der Amplitude  $V_0$  aufgeprägt (siehe Abb. 3.35). An dem Punkt 2 in der Schaltung variiert die Spannung zwischen 0 und  $2V_0$ , während sich an Punkt 2 eine Gleichspannung von  $2V_0$  einstellt. Diese einzelne Kaskade läßt sich vervielfältigen und man erreicht bei  $N$  Kaskaden eine Beschleunigungsenergie  $E$  eines Teilchens mit Ladung  $e$  von

$$E = 2eNV_0 \quad (3.100)$$

Mit dieser so erzeugten Hochspannung läßt sich ein einfacher bzw. ein **Tandem-Beschleuniger** betreiben. Beim Tandem-Beschleuniger wird der Spannungsabfall zweimal ausgenutzt. Zunächst wird in einer Gasentladung aus einem Atom  ${}_Z X$  ein negatives Ion  ${}_Z X^-$  erzeugt. Dieses wird zum sog. **Terminal**, das auf positiver Spannung liegt, beschleunigt und erhält eine Energie  $eV_0$  (siehe Abb. 3.36). In dem Terminal durchläuft das Projektil eine

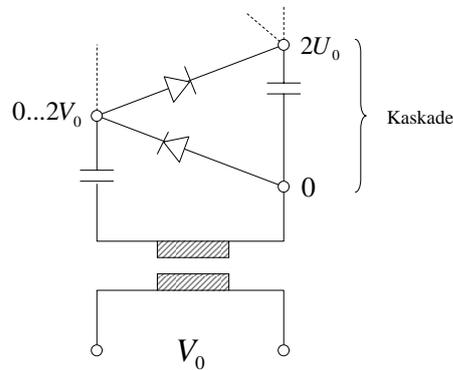


Abbildung 3.35: Kaskaden-Schaltung.

dünne Folie, in der die Hüllen-Elektronen abgestreift werden. Eine Umladung zu maximal  $Z$  positiv geladenen Ionen  ${}_Z X^{Z+}$  findet statt. Das Projektil durchläuft auf dem Weg zum Target wieder die Beschleunigungsspannung und erhält dabei eine Energie  $eZV_0$ . Die Gesamtenergie ergibt sich beim Tandem-Beschleuniger demnach zu:

$$E = e(Z + 1)V_0 \quad (3.101)$$

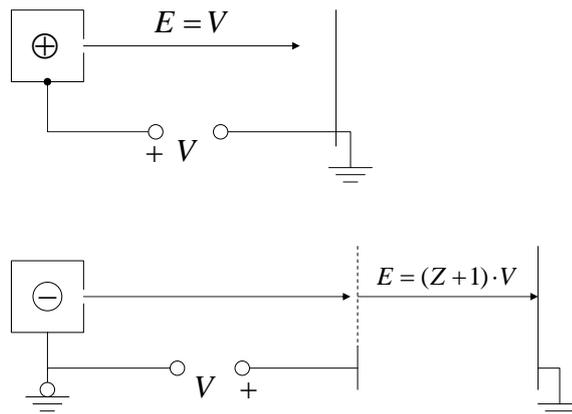


Abbildung 3.36: Potential-Beschleuniger. Linear / Tandem.

### 3.4.3 Linear-Beschleuniger

In einem Linear-Beschleuniger wird eine Beschleunigungsspannung vielfach genutzt, um hohe Energien der Teilchen zu erzeugen. Die einfachste Bauform ist eine Abfolge von Röhren die jeweils alternierend an eine HF-Spannungsversorgung angeschlossen sind. Zwischen den Röhren herrschen alternierende elektrische Felder einmal in und einmal entgegen der Flugrichtung des Projektils. Stimmt man die HF-Frequenz so ab, daß immer, wenn das Teilchen sich in einem Spalt befindet, auch das Feld in dieselbe Richtung zeigt, so bekommt man eine kontinuierliche Beschleunigung. Die Länge bzw. der Abstand der Röhre muß bei niedrigen Geschwindigkeiten die Laufzeitänderung durch Beschleunigung der Teilchen in den einzelnen Spalten berücksichtigen. Bei relativistischen Energien ändert sich die Geschwindigkeit kaum noch und eine weitere Beschleunigung erhöht im wesentlichen die Masse des Teilchens. Damit ist eine periodische Anordnung von gleichartigen Röhren möglich.

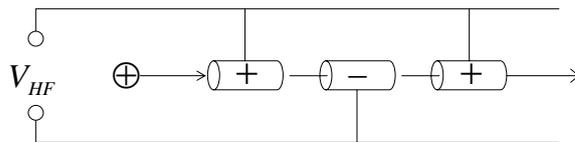


Abbildung 3.37: Linear-Beschleuniger.

Bei relativistischen Teilchen werden zudem auch Hohlraum-Resonatoren verwendet. In einem Hohlraum befindet sich eine Anordnung von Röhren, ähnlich zu Abb. 3.37. In diesem Hohlraum wird ein hochfrequentes E-Feld eingekoppelt und es bilden sich stehende Wellen aus. Ein Projektil durchläuft diesen Hohlraum auf der Achse dieser Röhren. Falls diese Bewegung mit der Hochfrequenz synchronisiert erfolgt, so sieht das Projektil immer am Ort zwischen den Röhren ein beschleunigendes Feld.

### 3.4.4 Kreis-Beschleuniger

Will man in einem Linear-Beschleuniger hohe Energien erreichen, so muß man eine Beschleunigung über große Strecken realisieren, da die Beschleunigungs-Strecke nur einmal durchlaufen werden kann. Dies vermeidet man mit einem Kreis-Beschleuniger, der Teilchen kontinuierlich zu hohen Energien beschleunigt, da bei jedem Umlauf eine Beschleunigungs-Strecke mehrfach durchlau-

fen werden kann<sup>13</sup>.

Für einfache Kreisbeschleuniger existieren mehrere Methoden:

- **Zyklotron**

Beim **Zyklotron** hat man zwei halbkreisförmige Segmente mit einem Magnetfeld, das senkrecht dazu orientiert ist (siehe Abb. 3.38). Diese Segmente bestehen aus plan parallelen Platten, zwischen denen die Projektile sich in einem konstanten Magnetfeld bewegen. Projektile einer Masse  $m$  durchlaufen eine Kreisbahn mit Radius  $R$ , die sich aus dem Gleichgewicht zwischen Lorentzkraft und Zentrifugalkraft ergibt. Bei Geschwindigkeit  $v_{\perp}$  senkrecht zum Magnetfeld ist dies:

$$Zev_{\perp}B = \frac{mv_{\perp}^2}{R} \quad (3.102)$$

Der Radius der Bahn ist damit:

$$R = \frac{mv_{\perp}}{ZeB(R)} \quad (3.103)$$

Die Umlauffrequenz ist die sog. **Zyklotronfrequenz**:

$$\boxed{\omega_c = \frac{v_{\perp}}{R} = \frac{ZeB}{m}} \quad (3.104)$$

d.h. die Umlauffrequenz ist nicht von der Geschwindigkeit des Teilchens abhängig.

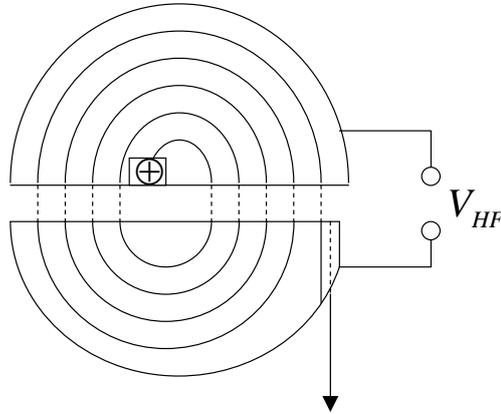
Zwischen den Segmenten des Zyklotrons ist eine Hochfrequenz  $\omega_{rf}$  angelegt, die ein alternierendes elektrisches Feld im Spalt zwischen den Halbkreisen erzeugt. Ist die Frequenz so eingestellt, daß das Teilchen immer dann ein beschleunigendes E-Feld sieht, wenn es sich in dem Spalt befindet, bekommt man eine Beschleunigung.

$$\omega_{RF} = \omega_c = \frac{ZeB}{m_0} \quad (3.105)$$

Die Geschwindigkeit der Teilchen erhöht sich und die Bahnradien werden größer gemäß Gl. 3.103. Auf einer Bahn mit maximalem Radius  $R$  werden die Projektile dann abgeführt.

---

<sup>13</sup>Der Vorteil eines Linear-Beschleunigers ist allerdings dessen geringere Strahlungsverluste durch **Synchrotron-Strahlung**. Dies ist besonders wichtig bei der Erzeugung von schnellen Elektronen.



**Abbildung 3.38:** Ein Zyklotron besteht aus zwei halbkreisförmigen Segmenten, die ihrerseits aus plan parallelen Platten bestehen.

Problem beim Zyklotron ist die relativistische Massenzunahme bei hohen Energien. Damit man die relativistische Massenzunahme in Gl. 3.105 berücksichtigen kann, muß die Frequenz synchron erniedrigt werden. Man spricht von einem **Synchro-Zyklotron**.

- **Betatron**

Eine kompaktere Form eines Zyklotrons kann man in einem sog. **Betatron realisieren**. Hierbei wird eine Kreisbahn mit konstantem Radius realisiert, indem mit der Beschleunigung auch das Magnetfeld erhöht wird, so daß sich die Änderung in  $v_{\perp}$  und in  $B$  in Gl. 3.103 kompensieren.

Durch die Verwendung eines veränderlichen Magnetfeldes wird gleichzeitig eine Spannung (wegen  $\nabla \times E = -\dot{B}$ ) auf der Kreisbahn mit Radius  $R$  induziert, die eine Fläche  $A$  umschließt (siehe Abb. 3.39).

$$U_{ind} = \oint_s E ds = \int_A \nabla \times E dA \simeq R^2 \pi \frac{d}{dt} \langle B \rangle = E 2\pi R \quad (3.106)$$

mit  $\langle B \rangle$  dem über die Fläche  $A$  gemittelten Magnetfeld. Die Impulsänderung pro Umlauf ist damit:

$$\Delta(mv_{\perp}) = \int_{Umlauf} F dt = \int e E dt = \frac{eR}{2} \int \frac{d\langle B \rangle}{dt} dt = \frac{eR}{2} \langle B \rangle \quad (3.107)$$

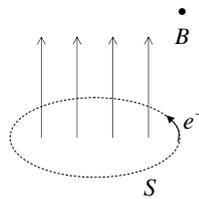


Abbildung 3.39: Betatron

Damit das Teilchen auf seiner Kreisbahn konstant umläuft, muß der Mittelwert des Magnetfeldes  $\langle B \rangle$  und der Wert des Magnetfeldes  $B(R)$  am Ort der Kreisbahn gemäß Gl. 3.103 folgender Bedingung genügen:

$$B(R) = \frac{1}{2} \langle B \rangle \quad (3.108)$$

- **Synchrotron**

Bei einem Synchrotron wird eine lineare Beschleunigungsstrecke mehrmals durchlaufen, da ein ringförmiges Strahlrohr die Teilchen wieder der Beschleunigungsstrecke zuführt. Damit die Umlaufzeit und die Hochfrequenz der Beschleunigungsstrecke synchronisiert werden können, muß das Magnetfeld, das die Teilchen auf der Kreisbahn hält, synchron nachgeführt werden. Insbesondere die relativistische Massenzunahme muß dabei berücksichtigt werden.

$$B(R) = \frac{mv_{\perp}}{eR} = \frac{v_{\perp}}{eR} \frac{m_0}{\sqrt{1 - \frac{v_{\perp}^2}{c^2}}} \quad (3.109)$$

Zunächst werden mit einem einfachen Zyklotron Teilchen beschleunigt und mit MeV in den Synchrotronring eingeschossen. In mehreren Umläufen wird dann die Teilchenenergie erhöht und bei Erreichen des gewünschten Arbeitspunktes wird der Strahl über ein schaltbares Magnetfeld ausgekoppelt. Synchrotronringe werden in der Regel gepulst betrieben, um eine zeitliche Synchronisation der Experimente zu ermöglichen.

Um die Brillanz des Strahls zu erhöhen sind auf den Beschleunigungsstrecken zahlreiche fokussierende Linsen eingebracht. Eine besondere Art der Korrektur des Teilchenstrahls ist die sog. **stochastische Kühlung**, eine aktive Feedbackregelung der Strahlposition. Hierbei

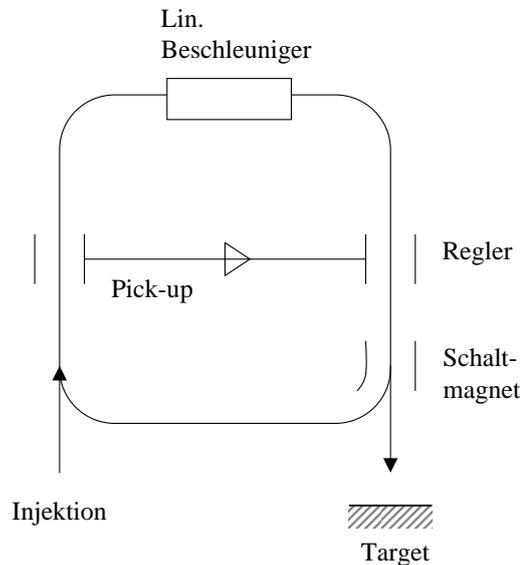


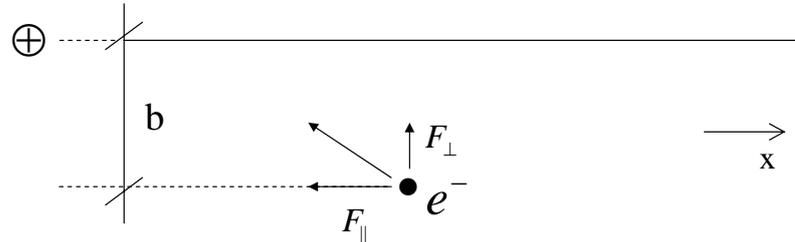
Abbildung 3.40: Synchrotron

wird über eine Pickup-Sonde eine etwaige Auslenkung des Teilchenstrahls von seiner Sollbahn detektiert. Über eine Signalleitung wird dieses Ergebnis auf die andere Seite des Synchrotronringes übertragen und eine entsprechende Korrektur durch Ablenkfelder vorgenommen. Nachdem die Teilchen mit nahezu Lichtgeschwindigkeit den Synchrotronring umlaufen, muß das Korrektursignal die *Abkürzung* durch die Mitte des Ringes nehmen, um rechtzeitig vor der Ankunft des Teilchenpulses eine Korrektur mit einer entsprechenden Ablenklinse einstellen zu können.

### 3.4.5 Wechselwirkung Strahlung / Materie

#### Teilchen

Bei der Wechselwirkung schneller, schwerer Teilchen wie Protonen oder  $\alpha$ -Teilchen mit einem Festkörper unterscheidet man den **elektronischen** und den **nuklearen** Energieverlust. Der elektronische Energieverlust entspricht einer Anregung der Elektronen in dem Festkörper durch das eindringende Projektil. Hierbei verringert sich die Energie des Projektils. Der Impuls ändert sich kaum, da das Massen-Verhältnis Projektil zu Elektron ungünstig ist. Beim nuklearen Energieverlust, wird Energie und Impuls auf einen Atomkern des Targets übertragen.



**Abbildung 3.41:** Bei dem elektronischen Verlust wird durch ein Projektil Energie an ein Elektron des Targets abgegeben. Dabei ändert sich der Impuls kaum.

Diese Beiträge ergeben sich wie folgt:

- **elektronischer Energieverlust**

Betrachten wir zunächst ein energetisches Teilchen, das einen Festkörper durchdringt. Durch die Coulomb-Wechselwirkung kann es Energie auf ein Elektron des Festkörpers übertragen. Die Kraft zwischen Projektil mit Ladung  $Z$  und Elektron ist (siehe Abb. 3.41):

$$\vec{F} = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{x^2 + b^2} \vec{e}_r = -\vec{E}e \quad (3.110)$$

Diese Kraft führt zu einer Änderung des Impulses gemäß:

$$\Delta p_{e^-} = \int \vec{F} dt \quad (3.111)$$

Wegen des Massenunterschiedes bleibt der Impulsübertrag und auch die Ablenkung des Projektils aber gering und die Geschwindigkeit, ändert sich in erster Näherung nur wenig. Damit läßt sich die Geschwindigkeit vor das Integral schreiben und die Zeitabhängigkeit in eine Ortsabhängigkeit umschrieben (via  $dt = \frac{dt}{dx} dx = \frac{1}{v} dx$ ):

$$\Delta p_{e^-} = \int \vec{F} dt \simeq \frac{1}{v} \int F dx \quad (3.112)$$

Die Änderung des Impulses des Elektrons ist das Integral über diese Kraft über die Flugstrecke des Projektils, wobei die Kräfte  $F_{||}$  sich heraus mitteln.

$$\Delta p_{e^-} = \int \vec{F} dt \simeq \frac{1}{v} \int F dx = \frac{1}{v} \int F_{\perp} dx \quad (3.113)$$

Die Kraft  $F_{\perp}$  ist:

$$F_{\perp} = F \frac{b}{\sqrt{x^2 + b^2}} \quad (3.114)$$

Damit bekommen wir

$$\begin{aligned} \Delta p_{e^-} &= \frac{1}{v} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{x^2 + b^2} \frac{b}{\sqrt{x^2 + b^2}} dx \\ &= \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 vb} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \frac{b^2}{(x^2 + b^2)^{3/2}} dx}_{\sim 2} \\ &= \frac{1}{2\pi\epsilon_0} \frac{1}{vb} Ze^2 \end{aligned} \quad (3.115)$$

Dies entspricht genau der Annahme, daß der Impuls des Projektils sich nur unwesentlich ändert. Die Änderung der Energie ist somit:

$$\Delta E = \frac{\Delta p^2}{2m_e} = \frac{1}{8\pi^2\epsilon_0^2 m_e} \left( \frac{Ze^2}{vb} \right)^2 \quad (3.116)$$

Der Energieverlust des Projektils pro Wegstrecke  $dx$  im Festkörper erhält man aus der Integration über alle möglichen Stoßparameter:

$$-\frac{dE}{dx} = \int_{b_{min}}^{b_{max}} \Delta E n_e 2\pi b db \quad (3.117)$$

mit  $n_e$  der Elektronendichte. Man bekommt

$$-\frac{dE}{dx} = \frac{Z^2 e^4 n_e}{4\pi\epsilon_0^2 v^2 m_e} \ln \frac{b_{max}}{b_{min}} \quad (3.118)$$

Die Schwierigkeit besteht jetzt in der Bestimmung der Integrationsgrenzen für den Stoßparameter. Diese lassen sich wie folgt abschätzen:

–  $b_{min}$

Bei einem minimalen Stoßparameter bekommt man den maximalen Energieübertrag. Aus der Energie- und Impulserhaltung bei einem zentralen Stoß bekommt man für die maximal übertragene Energie  $E_1$  (bei einer Energie  $E_0$  des einfallenden Teilchens, Massen  $m_p$  und  $m_e$  von Projektil und Elektron):

$$E_1 = 4 \frac{m_p m_e}{(m_p + m_e)^2} E_0 \quad (3.119)$$

mit  $m_p \gg m_e$  und  $E_0 = \frac{1}{2} m_p v^2$  ergibt sich:

$$E_1 = 4 \frac{m_e}{m_p} \frac{1}{2} m_p v^2 = 2 m_e v^2 \quad (3.120)$$

Die potentielle Energie bei einem minimalen Abstand ist:

$$E_{pot} = \frac{Z e^2}{4 \pi \epsilon_0 b_{min}} \quad (3.121)$$

Man setzt jetzt die potentielle Energie und die übertragene Energie gleich und bekommt damit:

$$b_{min} = \frac{Z e^2}{4 \pi \epsilon_0 2 m_e v^2} \quad (3.122)$$

–  $b_{max}$

Bei einem maximalen Stoßparameter wird der Energieübertrag minimal. Die minimale Energie, die übertragen wird, ist in der Regel die mittlere Ionisierungsenergie  $\langle I \rangle$ , da kleinere Energieüberträge an gebundene Elektronen nicht möglich sind. Man bekommt damit

$$\langle I \rangle = E_{pot} = \frac{Z e^2}{4 \pi \epsilon_0 b_{max}} \quad (3.123)$$

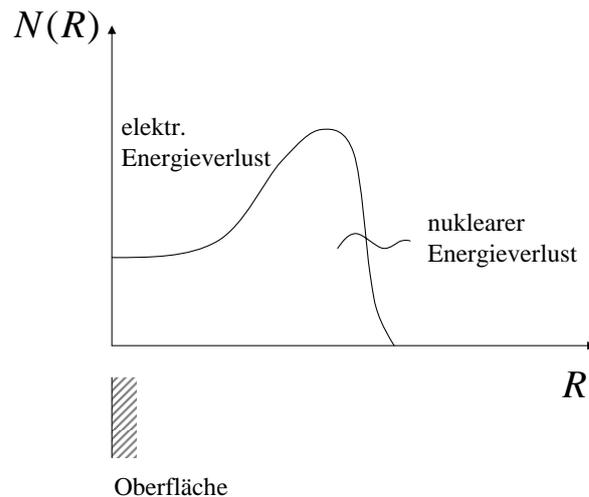
Damit wird der Energieverlust der Teilchen in einem Festkörper zu:

$$\boxed{\frac{dE}{dx} = - \frac{Z^2 e^4}{4 \pi \epsilon_0^2} \frac{n_e}{m_e v^2} \ln \frac{2 m_e v^2}{\langle I \rangle}} \quad (3.124)$$

Dies bezeichnet man als **Bethe-Bloch-Formel**.

- **nuklearer Energieverlust**

Der nukleare Energieverlust beschreibt die Abbremsung des Projektils durch Stöße mit den Atomkernen. Hierbei ändert sich Energie und Impuls signifikant, da die Massen von Projektil und Targetatomkern vergleichbar sind.



**Abbildung 3.42:** Bragg-Peak.

Der Wirkungsquerschnitt für die Streuung bestimmt den Streuwinkel und damit den Energieverlust. Bei hohen Energien ist der Wirkungsquerschnitt für Coloumb-Streuung wegen der  $1/E^2$  Abhängigkeit sehr klein und die Energie des Teilchens verringert sich nur durch den elektronischen Energieverlust. Erst bei genügend kleinen Energien wird der Coloumb-Querschnitt signifikant. Die großen Streuwinkel entsprechen einem großen Energieübertrag, wie sich aus der Kinematik eines Zweierstoßes ablesen lässt. Durch den starken Energieverlust werden die Projektile in einem begrenzten Tiefenbereich vollständig abgebremst. Diesen Peak bezeichnet man als **Bragg-Peak** (siehe Abb. 3.42).

Diese lokale Überhöhung der implantieren Projektile wird in der Halbleiterindustrie als Tiefenimplantation und in der Medizintechnik als lokale Behandlungsmethode von Tumoren genutzt.

## Photonen

Bei der Wechselwirkung von Photonen mit Materie kann man mehrere Prozesse unterscheiden:

- **elastische Streuung**

Bei der elastischen Streuung wie der **Raleigh-Streuung** ändert sich die Wellenlänge des Photons nicht. Demzufolge ändert sich zwar die Richtung aber Energieverlust tritt nicht auf.

- **inelastische Streuung, Comptoneffekt**

Bei der inelastischen Streuung an freien Elektronen wird Energie durch den **Compton-Effekt** übertragen. Der Wirkungsquerschnitt skaliert mit der Elektronendichte, gegeben als Kernladungszahl, und der Energie  $E_\gamma$  des  $\gamma$ -Quants wie:

$$\sigma_{Compton} \propto \frac{Z}{E_\gamma} \quad (3.125)$$

- **Photoeffekt**

Bei der inelastischen Streuung an gebundenen Elektronen werden Elektronen auf höher liegende diskrete Energieniveaus angehoben. Dies entspricht einem internen Photoeffekt. Der Wirkungsquerschnitt für diesen Prozeß skaliert wie:

$$\sigma_{Photoeffekt} \propto \frac{Z^5}{E_\gamma} \quad (3.126)$$

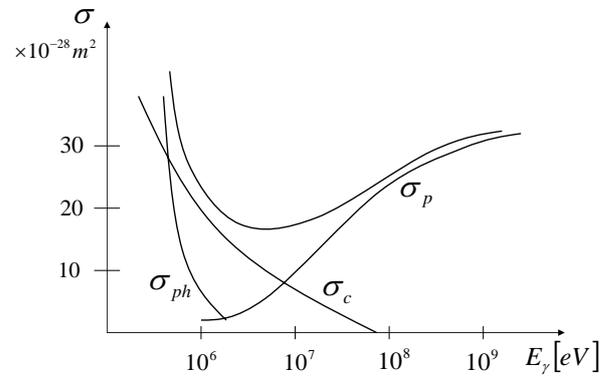
- **Absorption Kern**

Das  $\gamma$ -Quant kann direkt vom Atomkern absorbiert werden und Anregung der Nukleonen selbst verursachen. Dieser Beitrag wird erst bei sehr hohen Energien wichtig.

- **Paarbildung**

Falls die Energie der  $\gamma$ -Quanten eine Energie entsprechend zweimal der Ruhemasse des Elektrons überschreitet, tritt Paarbildung auf. Hierbei wird zunächst spontan ein Elektron-Positron-Paar gebildet, das nachfolgend wieder in zwei  $\gamma$ -Quanten entsprechend zweimal 511 keV zerstrahlt. Dieser Prozeß kann nur in der Nähe eines Atomkerns stattfinden, um gleichzeitig die Energie- und Impulserhaltung zu erfüllen. Der Wirkungsquerschnitt für diesen Prozeß ist:

$$\sigma_{Paarbildung} \propto Z^2 \ln E_\gamma \quad (3.127)$$



**Abbildung 3.43:** Wirkungsquerschnitt für die Absorption von  $\gamma$ -Quanten.

Trägt man alle diese Prozess wie in Abb. 3.43 auf, so erkennt man, daß der Wirkungsquerschnitt bei niedrigen Energien zunächst wegen der  $1/E_\gamma$ -Abhängigkeit von Compton-Streuung und Photoeffekt abnimmt und erst bei Energie oberhalb  $10^6$  eV wieder zunimmt, wegen dem Beitrag der Paarbildung.

### 3.4.6 Detektoren

Kernphysikalische Experimente bestehen aus einem Teilchen-Beschleuniger und entsprechenden Detektoren für den Nachweis der Reaktionsprodukte. Im folgenden seien einige typische Detektoren beschrieben, die jeweils das Auftreffen eines energetischen Projektils, dessen Energie oder dessen Trajektorie auflösen sollen.

#### Ionisationskammer

In einer Ionisationskammer erzeugt ein einfallendes Teilchen zunächst über Primär-Ionisation Elektronen und Ionen in einem Gasvolumen. Das Gasvolumen befindet sich in einem Plattenkondensator mit einem elektrischen Feld, das die entstehenden Ionen und Elektronen absaugt. Ein Strompuls wird beobachtet. Je nach Art der Strahlung und der Spannung, die an dem Gasvolumen anliegt, beobachtet man unterschiedliche Ströme:

- **Ohmscher Bereich**

Das einfallende Projektil erzeugt Ionen und Elektronen über Dissoziation, die Feldstärke ist klein und nicht alle Ladungsträger erreichen die Elektroden, da ein Teil vorher rekombiniert. Mit steigender Spannung steigt auch der Strom, da die erzeugten Ionen und Elektronen zunehmend die Möglichkeit haben die Elektroden zu erreichen. Wegen der linearen Abhängigkeit zwischen Strom und Spannung spricht man vom Ohm'schen Bereich.

- **Sättigungs-Bereich**

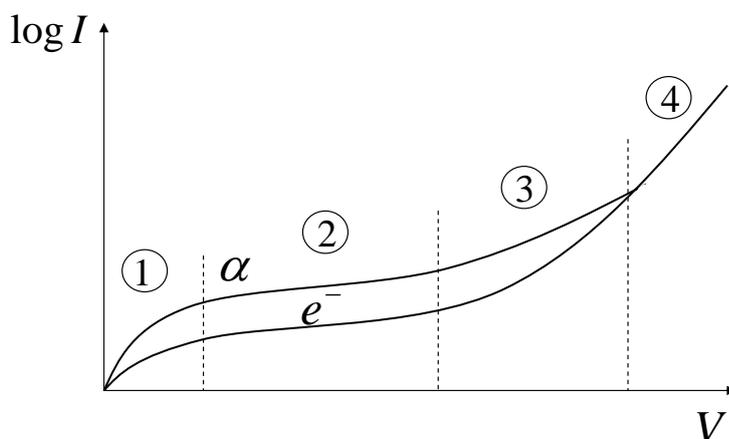
Bei genügend hoher Spannung werden alle in der Primär-Ionisation erzeugten Ionen und Elektronen abgesaugt und der Strom ist unabhängig von der angelegten Spannung

- **Proportional-Bereich**

Bei höherer Spannung können die Elektronen der Primär-Ionisation so stark beschleunigt werden, daß diese wiederum zu weiterer Ionisation des Gasvolumens führen. Durch diese Sekundär-Ionisation bildet sich eine *Elektronenlawine* aus. Mit steigender Spannung wird die Vielfältigkeit der Elektronen dominanter. Der entstehende Strom hängt allerdings noch von der Art der Primär-Ionisation ab: ein  $\alpha$ -Teilchen induziert eine stärkere Elektronen-Lawine im Vergleich zu einem Elektron als Projektil.

- **Geiger-Müller-Bereich**

Bei sehr hoher Spannung wird der Elektronenstrom nur noch abhängig von den Eigenschaften der Lawinen-Ausbildung. Die Art der Primär-Ionisation hat keinen Einfluss auf die Ausbildung der Elektronenlawine. Unabhängig von dem einfallenden Projektil wird immer das gleiche Signal beobachtet.



**Abbildung 3.44:** Betriebsmodi einer Ionisationskammer. (1) Ohm'scher Bereich (2) Sättigungsbereich (3) Proportional-Bereich (4) Geiger-Müller Bereich.

### Halbleiter-Detektor

In Halbleiter-Detektoren führt die Absorption eines Projektils der Energie  $E_{\text{Projektil}}$  zur Erzeugung von Elektron-Loch-Paaren durch Anregung von Valenzelektronen in das Leitungsband. Findet diese Absorption im Gebiet des **pn-Übergangs** statt, so findet Ladungsträger-Trennung statt und man beobachtet einen Strom. Dies ist analog zur Funktionsweise einer Solarzelle.

In einem Halbleiter-Detektor kann nicht nur das Auftreffen des Teilchens, sondern prinzipiell auch dessen Energie bestimmt werden. Bei der Abbremsung des Projektils im pn-Übergang ist die Anzahl der erzeugten Elektron-Loch-Paare ein Maß für die Energie des einfallenden Projektils. Diese Zahl  $N$  der Elektron-Loch-Paare ergibt sich näherungsweise aus:

$$N = \frac{E_{\text{Projektil}}}{E_{\text{gap}}} \quad (3.128)$$

$E_{gap}$  ist die Bandlücke. Ein Nachteil der Halbleiter-Detektoren ist der Umstand, daß die Ladungsträgertrennung nur innerhalb der Raumladungszone funktioniert. Diese Zone kann durch einen intrinsischen Bereich (un-dotierter Bereich zwischen der p- und der n-Zone) erhöht werden, bleibt aber im Volumen begrenzt. D.h. bei sehr energetischen Teilchen, die nur über große Wegstrecken vollständig abgebremst werden können, müssen andere Nachweismethode gewählt werden. Ein Beispiel sind Szintillationszähler.

### Szintillator

Bei einem Szintillator werden Elektronen-Loch-Paare zunächst in einem Szintillator-Material (z.B. NaJ-Kristall) erzeugt. Die Rekombination führt zur Emission von Photonen. Die Zahl der Photonen ist wieder proportional zur Energie des einfallenden Projektils. Die Photonen lösen auf einer Photokathode Elektronen aus, die in einem Sekundärelektronen-Vervielfältiger (SEV) verstärkt werden.

In einem SEV wird an Dynoden in aufsteigender Reihenfolge eine Spannung angelegt. Beim Auftreffen von  $N_1$  Elektronen auf einer Dynode werden  $N_2$  Sekundär-Elektronen ( $N_2 > N_1$ ) erzeugt. Bei einer Abfolge von mehreren Dynoden findet damit eine Verstärkung des Elektronenstroms statt.

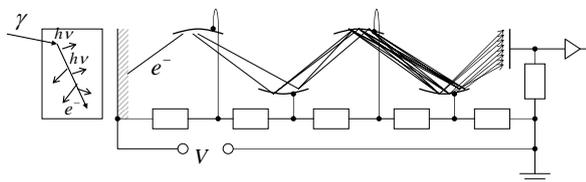


Abbildung 3.45: Szintillations-Zähler.

### Spuren-Detektor

In den bisherigen Detektoren wurde das Auftreffen eines Projektils bzw. dessen Energie nachgewiesen. Eine Variation der Ionisationskammer ist eine **Vieldrahtkammer**, in der der Strom auf einem Array von Drähten abgesaugt wird. Durch die lokale Absaugung kann über eine Analyse der Ströme auf den jeweiligen Drähten die Trajektorie des Projektils rekonstruiert werden.

Bei Vieldrahtkammern ist die Auflösung auf den Abstand der Drähte begrenzt. Höhere Ortsauflösung kann in sog. Spurendetektoren erreicht werden.

Legt man noch zusätzlich ein starkes Magnetfeld an, so kann man aus dem Gyrationradius das  $e/m$ -Verhältnis der Teilchen bestimmen.

In einem Spuren-Detektor wird ein Medium in einen überkritischen Zustand überführt, zum Beispiel übersättigter Dampf bzw. eine überhitzte Flüssigkeit. Eine Störung, wie etwa die Primär-Ionisation durch ein auftreffendes Projektil, stellt einen Kondensationskeim dar und induziert einen lokalen Phasenübergang. Bei einem übersättigten Dampf entsteht am Ort der Primär-Ionisation durch ein einfallendes Teilchen ein Tröpfchen, auf seiner Trajektorie - entsprechend ein Kondensstreifen. Bei einer überhitzten Flüssigkeit entsteht am Ort der Trajektorie eine Spur von Dampfbläschen. Erstes Konzept bezeichnet man als **Nebelkammer**, das zweite als **Blasen-**  
**kammer**.

Der Phasenübergang einer überkritischen Flüssigkeit oder eines überkritischen Gases läßt sich am pV-Diagramm eines realen Gases (Van-der-Waals-Gas) ablesen. Unterhalb einer kritischen Temperatur entsteht ein Bereich der Koexistenz der Phasen *Flüssigkeit* und *Gas*.

$$\left(p + \frac{a}{V_m^2}\right) (V_m - b) = RT \quad (3.129)$$

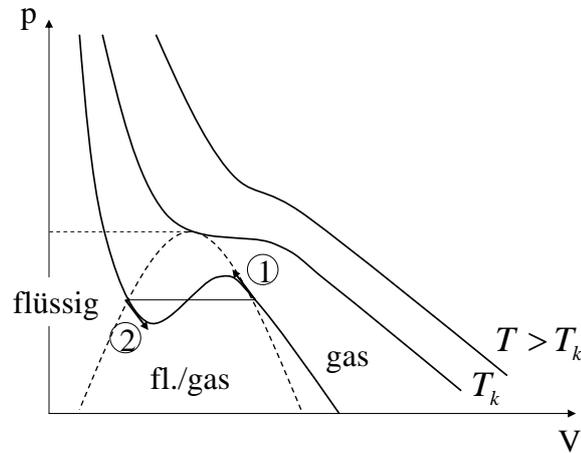
mit  $p$  dem Druck,  $V_m$  dem Volumen,  $R$  der Gaskonstante,  $T$  der Temperatur.  $a$  und  $b$  sind gasart-abhängige Koeffizienten. In einer Nebelkammer wird über einen Stempel ein Gasvolumen schnell komprimiert, wobei Druck, Volumen und Temperatur so gewählt sind, daß man sich nahe der Koexistenzgrenze befindet (siehe Abb. 3.46). Durch diese Änderung entsteht ein übersättigter Dampf, der durch einen Kondensationskeim (=Primär-Ionisation) am Ort der Trajektorie des einfallenden Teilchens ein Tröpfchen bildet.

In einer Blasen-kammer wird über eine Variation des Druckes eine überhitzte Flüssigkeit erzeugt. Am Ort der Trajektorie bilden sich durch diesen Kondensations-Keim Dampfbläschen.

Blasen-kammern haben den Vorteil, daß sie prinzipiell kleiner gebaut werden können, da wegen der höheren Dichte der Flüssigkeit im Vergleich zum Gas, das Teilchen auf kürzeren Strecken abgebremst werden kann.

### Cerenkov-Detektor

Bremst man ein Teilchen in einem Medium ab, so kann dessen Geschwindigkeit größer als die Lichtgeschwindigkeit in diesem Medium sein. Bei einem gegebenen Brechungsindex  $n_{medium}$  ist die Lichtgeschwindigkeit in dem Medium:



**Abbildung 3.46:** pV-Diagramm van der Waals Gas. (1) entspricht Zustandsänderung bei der Nebelkammer. (2) entspricht Zustandsänderung bei der Blaskammer.

$$c_{\text{medium}} = \frac{c}{n_{\text{medium}}} \quad (3.130)$$

Durch eine Teilchen-Geschwindigkeit größer als die Lichtgeschwindigkeit im Medium entsteht ein Strahlungskegel ähnlich einem Überschallkegel bei der Ausbreitung von Schallwellen, da das geladene Teilchen die Kugelwelle des sich ausbreitenden elektrischen Feldes überholt. Dieser Kegel hat einen charakteristischen Öffnungswinkel, der als:

$$\cos \Theta = \frac{c}{n_{\text{medium}} v} \quad (3.131)$$

gegeben ist. In der Regel benutzt man für einen Cerenkov-Zähler einen großen Wassertank, um den herum Photodetektoren angebracht sind. Der Cerenkov-Lichtkegel wird dann in Koinzidenz von einem Ring von Photodetektoren aufgezeichnet. Über die Orientierung und Größe dieses Ringes kann man auf die Richtung und die Geschwindigkeit der Teilchen schließen.

## 3.5 Kernreaktionen

### 3.5.1 Allgemeines

Eine Kernreaktion wird im allgemeinen beschrieben als der Beschuß eines Elements **X** mit einem Projektil **a**. Dabei entsteht ein Produkt **Y** und viel-

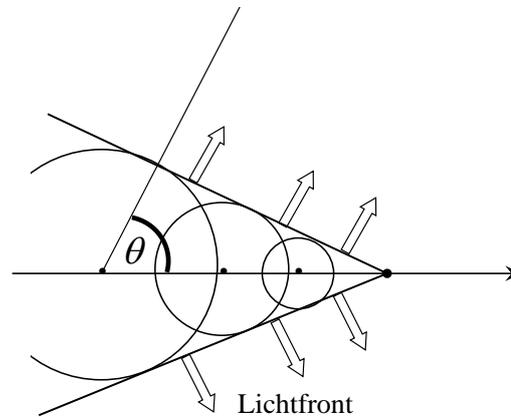


Abbildung 3.47: Cerenkov-Strahlung.

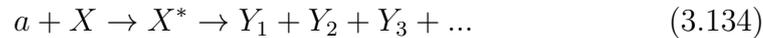
leicht ein abgespaltenes Teilchen **b**.



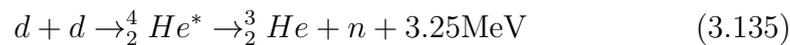
Dies wird verkürzt geschrieben als:



Ein Beispiel ist der Beschuß von Beryllium mit  $\alpha$ -Teilchen, bei dem Neutronen entstehen:  ${}^9_4\text{Be}(\alpha, n){}^{12}_6\text{C}$ . In der Regel entsteht bei der Kernreaktion zunächst ein angeregter Kern, ein **Compound-Kern**. Durch die vielen inneren Freiheitsgrade wird die Anregungsenergie verteilt und der angeregte Kern zerfällt entsprechend der Entartung der Ausgangskanäle. Durch die Existenz eines langlebigen Compound-Kerns  $X^*$  als Zwischenzustand ist die genaue Erzeugung durch **X** und **a** von untergeordneter Bedeutung für die Entstehung der einzelnen Reaktionsprodukte **Y**:



Ein Beispiel sei die Erzeugung von Helium Kernen in der **dd**-Reaktion:



Herbei entsteht zunächst ein angeregter  ${}^4\text{He}$ -Kern, der nachfolgend in einen  ${}^3\text{He}$ -Kern und ein Neutron zerfällt. Diese Zerfallskanäle hängen nicht von der genauen Orientierung der **dd** Projektile ab.

Man unterscheidet prinzipiell **exotherme** und **endotherme** Reaktionen. Bei exothermen Reaktionen wird eine **Wärmetönung**  $Q$  frei, während bei endothermen Reaktionen mindestens eine Wärmetönung  $Q$  aufgebracht werden muß, damit die Reaktion ablaufen kann.

$$Q > 0 \quad \text{exotherm} \quad (3.136)$$

$$Q < 0 \quad \text{endotherm} \quad (3.137)$$

Zusätzlich zu dieser Wärmetönung kann es notwendig sein, noch eine Aktivierungsenergie zu überwinden.

Alle Kernreaktionen gehorchen einem Satz von Erhaltungsgrößen:

- **Nukleonenzahl**

Bei einer Kernreaktion bleibt die Nukleonenzahl erhalten. D.h.  $A_1 + A_2 \rightarrow A_3 + A_4$ .

- **Ladung C**

Die Ladung der Konstituenten muß erhalten bleiben.

- **Drehimpuls**

Der Drehimpuls der Reaktanden, der durch die Relativbewegung und durch die Kernspins gegeben ist, muß erhalten bleiben.

- **Parität**

Die Parität der Ausgangsprodukte muß gleich der Parität der Endprodukte sein. Die Parität bezeichnet die Symmetrie der Wellenfunktion. Bei gerade Parität gilt  $\Psi(\vec{r}) = \Psi(-\vec{r})$ , bei ungerader Parität  $\Psi(\vec{r}) = -\Psi(-\vec{r})$ . Die Parität zweier Stoßpartner **A** und **B** wird ausgedrückt durch deren Eigenparitäten  $P_A$  und  $P_B$  und einen Drehimpulsanteil der Relativbewegung, die durch eine Drehimpulsquantenzahl  $l$  charakterisiert ist.

$$P_{AB} = P_A P_B (-1)^l \quad (3.138)$$

Die Erhaltung der Parität gilt nicht für alle Kernreaktionen. Wie oben schon gezeigt wurde, zeichnet sich der  $\beta$ -Zerfall dadurch aus, daß die Parität in Reaktionen der schwachen Wechselwirkung gerade nicht erhalten bleibt.

### 3.5.2 Kernspaltung

Eine wichtige Klasse von Kernreaktionen ist die Kernspaltung. Betrachtet man die Bindungsenergie pro Nukleon nach der Bethe-Weizsäcker-Formel, so erkennt man, daß es für große Kerne günstig ist, spontan zu spalten, da dadurch die Coloumbenergie reduziert werden kann:

$$E_{Coloumb} \propto -a_c \frac{Z^2}{A^{1/3}} \quad (3.139)$$

Für eine Spaltung muß zunächst der Kern deformiert werden, bis eine Einschnürung auftritt (siehe Abb. 3.48). Dabei wird die Oberflächenenergie größer:

$$E_{OF} \propto -a_s A^{2/3} \quad (3.140)$$

Überwiegt allerdings der entsprechende Gewinn in der Coloumbenergie, so findet Spaltung statt. Diese **spontane Spaltung** tritt für Elemente ein mit:

$$\frac{Z^2}{A} \leq 51 \quad (3.141)$$

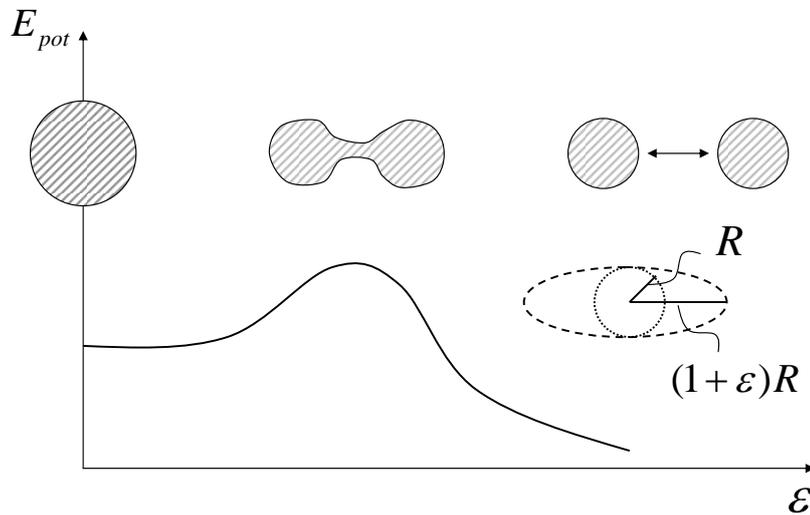


Abbildung 3.48: Kernspaltung.

Diese spontane Spaltung kann allerdings auch induziert werden durch den Beschuß von Atomkernen mit Neutronen. Hierbei werden wiederum neue Neutronen freigesetzt, die ihrerseits wieder weitere Kerne spalten können.

Die Zahl der Neutronen  $N_n$  einer Generation  $n$  induziert die Spaltung und erzeugt in einer Generation  $n + 1$  wieder  $N_{n+1}$  neue Neutronen. Dies kann durch eine **effektive Reaktionsrate**  $k_{eff}$  ausgedrückt werden als:

$$N_{n+1} = k_{eff} N_n \quad (3.142)$$

Ist  $k_{eff} > 1$ , findet eine **Kettenreaktion** statt.

Die bei dieser Kettenreaktion frei werdende Energie kann für die Energieerzeugung in einem Spaltungsreaktor genutzt werden. Für den Betrieb eines **Kernreaktors** muß die effektive Reaktionsrate bei  $k_{eff} = 1$  gesteuert werden. Dazu geht man wie folgt vor:

Als Brennstoff der Kernspaltung verwendet man das Isotop  $^{235}\text{U}$ , das zu 0.7 % natürlich vorkommt. Durch den Beschuß mit einem thermischen Neutron entsteht aus dem gu-Kern  $^{235}\text{U}$  zunächst ein angeregter gg-Kern  $^{236}\text{U}$ . Dies ist energetisch günstiger und die frei werdende Bindungsenergie kann genutzt werden, um die Spaltungs-Barriere zu überwinden. Dies ist im Gegensatz zu dem häufigsten Isotop  $^{238}\text{U}$ , ein gg-Kern, der nur durch schnelle Neutronen ( $> 1$  MeV) gespalten werden kann, da die frei gesetzte Bindungsenergie zur Überwindung der Spaltungs-Barriere nicht ausreicht.

Der Wirkungsquerschnitt für die Neutronen-induzierte Spaltung skaliert prinzipiell wie  $1/E^{1/2}$  beziehungsweise umgekehrt proportional zur Geschwindigkeit der Neutronen. Damit können Spalt-Reaktionen von  $^{235}\text{U}$  sehr viel häufiger auftreten als von  $^{238}\text{U}$ , da für  $^{235}\text{U}$  keine Schwellenergie nötig ist. Um die Effizienz eines Reaktors zu erhöhen, wird darum die Konzentration von  $^{235}\text{U}$  **angereichert**.

In der Spaltungsreaktion entstehen zunächst schnelle Neutronen. Damit der Einfang dieser Neutronen durch  $^{235}\text{U}$  effizient erfolgt, müssen diese zunächst abgebremst werden. Hierzu verwendet man einen sogenannten **Moderator** bestehend aus leichten Elementen (Wasser, Graphit etc.), die durch den nuklearen Energieverlust der Neutronen deren Energie reduzieren.

Die effektive Reaktionsrate setzt sich aus mehreren Faktoren zusammen. Betrachten wir eine Anzahl von Neutronen  $N_n$ , die in Generation  $n$  der Reaktion gebildet wird. Mit einer Effizienz  $\eta$  werden durch Neutronen-induzierte Spaltung neue Neutronen aus  $^{235}\text{U}$  erzeugt. Diese Neutronen sind zunächst schnell und tragen noch nicht effizient zu weiteren Spaltungsprozessen bei. Diese schnellen Neutronen können auch  $^{238}\text{U}$  spalten und die Zahl der Neutronen noch weiter erhöhen. Dies wird durch einen Faktor  $\epsilon$  berücksichtigt ( $\epsilon > 1$ ). Ein Anteil  $p$  wird in dem Moderator abgebremst, ohne das er durch Einfangreaktionen in den Uran-Isotopen ( $^{238}\text{U}(n,\gamma)$ -Reaktionen) verloren geht. Allerdings wird ein Teil  $f$  direkt im Moderator eingefangen und geht der Reaktion verloren. Die Verluste der Neutronen nach außerhalb des

Reaktorkerns sind in der Regel vernachlässigbar, da die Geometrie entsprechend optimiert wird. D.h. die effektive Reaktionsrate ergibt sich aus:

$$N_{n+1} = \underbrace{\eta \cdot \epsilon \cdot p \cdot f}_{k_{eff}} N_n \quad (3.143)$$

Den Ausdruck für  $k_{eff}$  bezeichnet man als **Vierfaktor-Formel**.

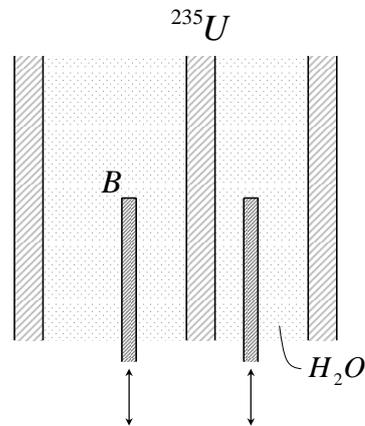
Im stationären Betrieb muß die effektive Reaktionsrate  $k_{eff}$  genau bei 1 gehalten werden. Der entsprechende Neutronenfluß in einem Reaktor wird durch Kontrollstäbe justiert, die aus einem Material bestehen, das sehr stark Neutronen einfängt, wie zum Beispiel Bor oder Cadmium (siehe Abb. 3.49). Steigt der Neutronenfluß zu stark an, so wird dieser Kontrollstab in den Reaktorkern eingefahren und schwächt diesen damit ab. Die erste selbständig sich erhaltende Kettenreaktion ist Enrico Fermi 1942 gelungen mit seinem Reaktor "Chicago Pile I".

Ein Kernreaktor kann nur deshalb bei einer effektiven Reaktionsrate  $k_{eff}$  nahe 1 geregelt werden, da ein Teil der Neutronen erst **verzögert** auftritt. Ein Teil der Reaktionsprodukte von Uran zerfallen durch schwache Wechselwirkung mit einer entsprechend längeren Lebensdauer: ungefähr 2% der Spalt-Neutronen wird erst nach einem Zeitraum von bis zu 80 s frei gesetzt. D.h. in dieser Zeit kann eine Regelung erfolgen, um den Neutronenfluß entsprechend  $k_{eff}=1$  zu justieren. Wäre dies nicht der Fall, so würde die Kettenreaktion für  $k_{eff} < 1$  schnell zum Erliegen kommen, bzw. bei  $k_{eff} > 1$  schnell unkontrolliert ablaufen.

Heutige Kernkraftwerke zeichnen sich durch ihre passive Sicherheit aus. Tritt zum Beispiel ein Fehler der Regelung auf und der Zustand  $k_{eff} > 1$  stellt sich ein, so führt die zugeführte Wärme sehr schnell zum Verdampfen des Moderators Wasser. Damit wird der Neutronenfluß nicht mehr abgebremst und die Kettenreaktion verlöscht. Diese passive Sicherheit ist bei Graphit-Reaktoren nicht gegeben, da Graphit erst bei sehr hohen Temperaturen sublimiert und vorher weiterhin zur Moderation des Neutronenflusses dienen kann. Diese war einer der Gründe für das Reaktorunglück in Tschernobyl 1984, bei dem der Reaktorkern thermisch auseinander fiel, wie im folgenden diskutiert wird.

### Das Reaktorunglück von Tschernobyl

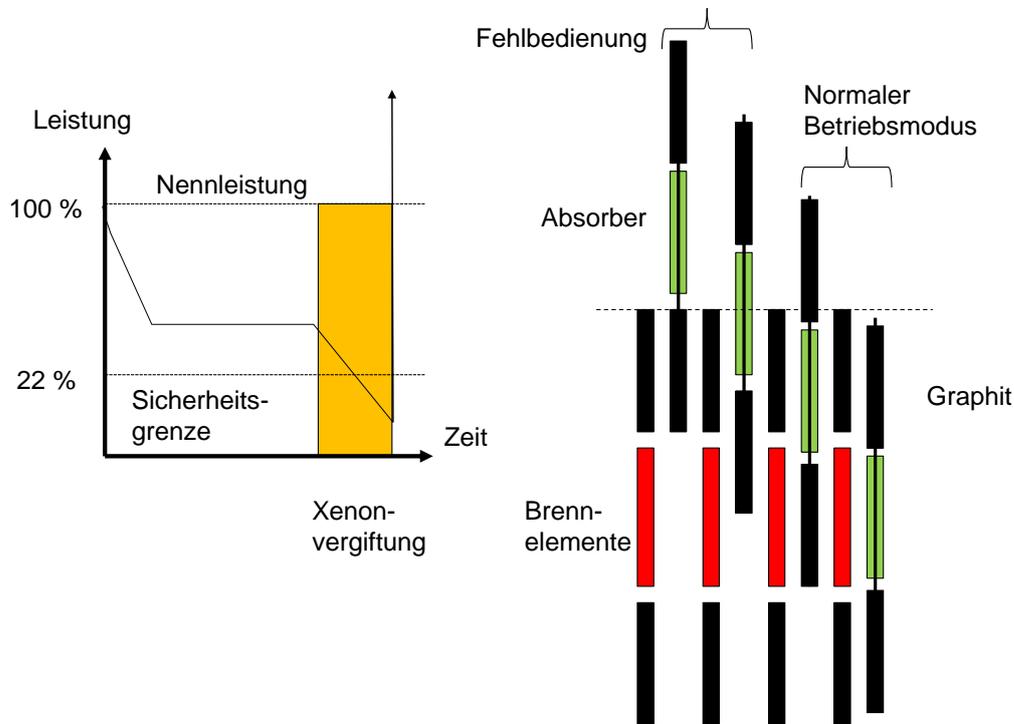
Der Kernreaktor im Kraftwerk Tschernobyl war vom dem Typ BRMK - ein so genannter Hochleistungskanalreaktor. Dabei umspielt das Kühlmittel Wasser die Brennelemente die in Graphitkanälen eingelassen sind. Graphit ist hierbei der Moderator. Durch dieses Design ist ein direkter Druckbehälter nicht



**Abbildung 3.49:** Kernreaktor bestehend aus Brennstäben mit einem Anteil von ca. 10%  $^{235}\text{U}$ , einem Moderator Wasser sowie einem Kontrollstab mit Bor (B) als Absorber.

notwendig und die Brennelemente können öfters gewechselt werden. In einem Druckwasserreaktor sind die Brennelemente hingegen in einem Druckbehälter eingeschlossen und ein Wechsel findet höchstens einmal im Jahr statt und kann auch nicht im laufenden Betrieb erfolgen. Der wichtige Unterschied ist allerdings der unterschiedliche **Dampfblasenkoeffizient**. Dieser beschreibt wie die Reaktivität des Reaktors sich bei der Entstehung von Dampfblasen im Kühlmittel ändert: bei einem Druckwasserreaktor ist dieser negativ, da Dampf weniger moderiert und damit der Fluss an thermischen Neutronen abnimmt wenn Blasen entstehen. Bei einem Graphit moderierten Reaktor nimmt die Reaktivität allerdings zu, da Wasser zum Teil auch absorbiert und die Moderation durch das Graphit durch die Entstehung von Dampfblasen nicht reduziert wird. Aus diesem Grund sind Graphit moderierte Reaktoren in der wesentlichen Welt nicht zulässig.

Bei dem Reaktor in Tschernobyl war 1986 ein Test angesetzt, um die Notlaufeigenschaften zu überprüfen, die notwendig sind, wenn das externe Stromnetz ausfällt. Dazu wollte man prüfen, ob der direkte Betrieb einer Dampfturbine des Reaktors selber ausreicht, um die Steuerungen wie Kühlung des Reaktors sicher zu betreiben um damit die Zeit zu überbrücken bis die Dieseleratoren den Notstrom liefern. Für diesen Test wurde die Reaktorleistung auf ca. 30% der Nennleistung heruntergefahren. Durch ein Fehler in der Programmierung des Reaktors fiel die Leistung allerdings bis auf den Prozentbereich ab. Dies lag unterhalb der Sicherheitsschwelle von 22%, die durch die so genannte Xenonvergiftung bedingt ist: bei der Spaltung entsteht das  $^{135}\text{Xe}$ -



**Abbildung 3.50:** Reaktorunglück von Tchernobyl. (links) Verlauf der Leistung bis zum Unglück. (rechts) Design des Kanalreaktors mit unterschiedlichen Positionen der Steuerstäbe.

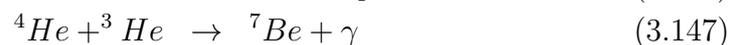
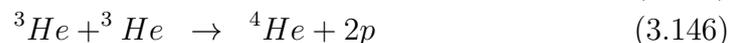
Isotop, dass ein starker Neutronenfänger ist. Durch diesen Neutroneneinfang wird es auch wieder abgebaut zu  $^{136}\text{Xe}$ . Falls ein ausreichender hoher Neutronenfluss (bei Leistungen oberhalb von 22% für diesen Reaktortyp) vorliegt, stellt sich ein geringer Gleichgewichtswert ein und der Reaktor kann normal betrieben werden. Sinkt allerdings der Neutronenfluss zu stark ab, akkumuliert das  $^{135}\text{Xe}$ -Isotop und die Reaktorleistung fällt weiter ab - ein negativer Feedback wirkt. Erst nach dem Ablauf der natürlichen Zerfallszeit von diesem Xenon-Isotop von 9 Stunden kann man deshalb einen Reaktor wieder hochfahren. Ein Reaktor, der einmal abgeschaltet wurde, kann erst nach ein paar Tagen wieder angeschaltet werden. In Tchernobyl erfolgte diese Xenonvergiftung nahezu unbemerkt. Als die Reaktormannschaft diese bemerkte, versuchte sie die Reaktorleistung wieder hochzufahren und fuhr dazu die Steuerstäbe weit aus dem Reaktorkern heraus, insbesondere über den Punkt hinaus, der die vorschriftsmäßige Grenze gewesen wäre (siehe Abb. 3.50). Daraufhin steigerte sich die Leistung wieder. Allerdings entstand jetzt eine

positive Rückkopplung, denn je mehr Neutronen gebildet werden desto besser wird Xe wieder abgebaut, desto weniger Neutronen werden absorbiert. Um diesen sprunghaften Anstieg der Leistung zu kontrollieren, initiierte die Reaktormannschaft schließlich eine Schnellabschaltung bei dem die Kontrollstäbe vollständig in den Reaktorkern gefahren werden sollten - sie kamen allerdings nur bis zur Hälfte - ein Konstruktionsfehler dieser Kontrollstäbe wurde zum Verhängnis: am Ende der Kontrollstäbe befand sich ein Graphitendstück, d.h. das Erste was die Kettenreaktion in im Innern des Reaktorkerns sieht, ist zusätzliches Graphit das die Moderation des Neutronenflusses verbessert! In diesem Moment steigerte sich die freigesetzt Leistung des Reaktors um dem Faktor 100. Die Folge war zunächst eine Dampfexplosion, anschließend folgte eine Knallgasexplosion, da das Wasser an den heißen Zirkonummantelungen der Brennelemente in Wasserstoff und Sauerstoff aufgespalten wurde. Diese beiden Explosionen im Sekundenabstand zerstörten das Reaktorgebäude nahezu vollständig. Anschließend brannte der heiße Grafitkern über mehrere Tage. Zudem schmolz sich das heiße nukleare Material des Kerns durch das Reaktorcontainment und kam erst im Betonfundament zum Stillstand.

### 3.5.3 Kernfusion

#### natürliche Fusion

Bei der Fusion von kleinen Atomkerne zu größeren wird Energie frei, da sich die Bindungsenergie pro Nukleon erhöht. Für die Verschmelzung von Protonen zum Beispiel müssen diese sich allerdings die abstoßende Coloumb-Barriere überwinden. Die dazu notwendigen Temperaturen bzw. Energien treten zum Beispiel im Inneren der Sonne auf. Hierbei verschmelzen Protonen untereinander zu Heliumkernen nach folgenden Reaktionen:



Diese Verschmelzung erfolgt nicht beliebig schnell, da einige Zwischenschritte gemäß der schwachen Wechselwirkung erfolgen mit entsprechend langen Lebensdauern. Wäre dies nicht der Fall, würde die Sonne ihren Energievorrat Protonen zu schnell verbrauchen. Bei diesen Reaktionen der schwachen

Wechselwirkung werden Neutrinos freigesetzt, die ohne Störung aus dem Inneren der Sonne uns erreichen.

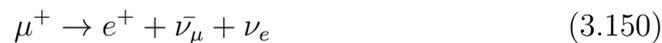
Die Messung des Neutrino-Flusses von der Sonne war und ist langer Gegenstand intensiver Forschung. In dem Gallex-Experiment wurde ein unterirdischer Tank mit GaCl als Detektor verwendet. Durch den Neutrino-Einfang wandelt sich Gallium in Germanium um, das mit einer Halbwertszeit von ca. 11 Tagen durch K-Einfang wieder zu Gallium zerfällt. Durch einen Stickstoffgasstrom wurde das GeCl bzw. GaCl ausgewaschen und nachfolgend in ein Zählrohr geführt, in dem der K-Einfang detektiert wurde.

In diesen aufwändigen Messungen wurden allerdings weniger Neutrinos beobachtet, als man erwartet hatte. Dies konnte entweder bedeuten, daß das Modell der Sonne inkorrekt war (i), oder das die Neutrinos, die man mißt, auf ihrem Weg von der Sonne sich ineinander umwandeln können (ii). Damit wären sie für die gewählte Nachweismethode unsichtbar und man würde ein Defizit beobachten. Nachdem das Modell der Sonne durch zahlreiche andere Beobachtungen erhärtet ist, blieb nur die zweite Möglichkeit der Neutrino-umwandlung. Ein solche Neutrino-umwandlung ist allerdings nur möglich, wenn Neutrinos eine Masse besitzen. Aus diesem Grund ist die Messung eines Neutrino-Defizits eine direkte Messung der Neutrinomasse. Durch die Schwierigkeit, Neutrinos allerdings überhaupt zu messen, war die Statistik dieser Daten nie ausreichend genug, um die Masse von Neutrinos zweifelsfrei nachweisen zu können.

Die Umwandlung von Neutrinos wurde erstmals in dem Superkamiokande Experiment beobachtet. Hierbei wurden atmosphärische Neutrinos beobachtet, die durch den Sonnenwind in der oberen Atmosphäre erzeugt werden. Die Reaktionen, die Neutrinos produzieren, stammen aus dem Zerfall von  $\pi$ -Mesonen, die bei  $pp$ -Stoßreaktionen entstehen:



Dabei entstehen Myonen, schwere Elektronen, die ihrerseits wieder in Positronen zerfallen:



D.h. auf der Erde kommt in einem Verhältnis von 2:1  $\nu_\mu$ - und  $\nu_e$ -Neutrinos an. Diese Neutrinos werden in einem großen Wassertank über die Reaktionen



nachgewiesen. Die schnellen Anti-Myonen und Positronen erzeugen Cerenkov-Strahlung, die über Photomultiplier beobachtet wird. Vergleicht man die Messungen am Tag und in der Nacht, ist die Entfernung des Detektors zum Erzeugungsort auf der Sonnenwind-zugewandten Seite unterschiedlich groß. Dabei zeigte sich, daß das Signal der  $\nu_\mu$ -Neutrinos mit dem Abstand abnimmt, während das Signal der  $\nu_e$ -Neutrinos unabhängig vom Tag-und-Nachtzyklus war. Dies kann erklärt werden, falls man annimmt, daß die  $\nu_\mu$ -Neutrinos sich in andere Neutrinos umwandeln können. Diese Neutrino-Oszillationen sind ein Indiz für deren Masse.

Neben der Fusion von Protonen existiert noch ein katalytischer Prozeß unter der Beteiligung von Kohlenstoffatomen. Dieser Prozeß kann allerdings erst in größeren Sternen stattfinden, bei denen die Fusion von Heliumkernen zu Kohlenstoff möglich ist. Liegen diese Kohlenstoffkerne allerdings vor, so können sie die Umwandlung von Protonen in Helium-Kernen analytisch erhöhen wie in Abb. 3.51 gezeigt ist. Dies bezeichnet man als **Bethe-Weisäcker-Zyklus**.

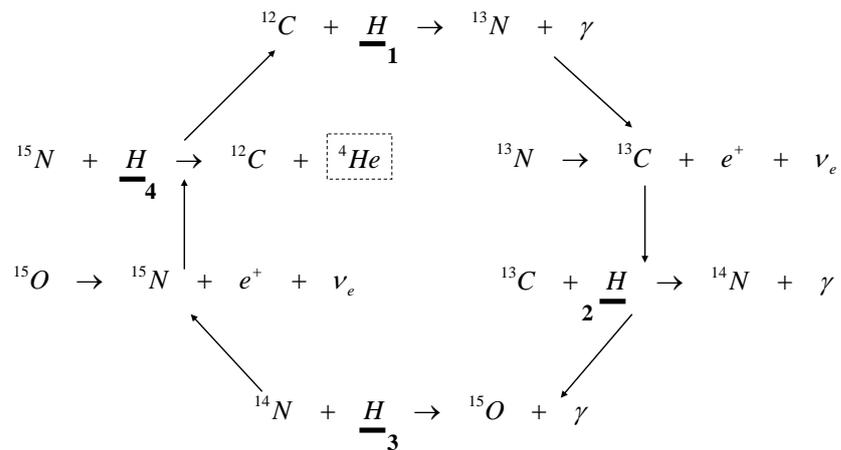
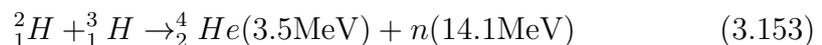


Abbildung 3.51: Bethe-Weisäcker-Zyklus.

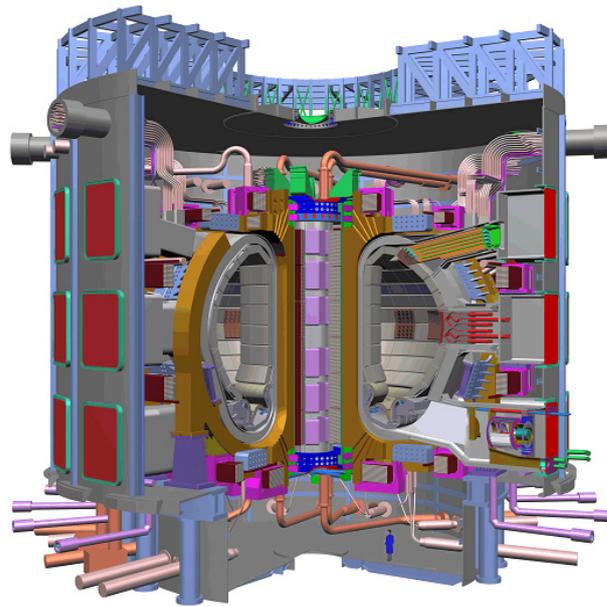
### Fusionsreaktor

Um den Energiegewinn bei der Kernfusion auch auf der Erde zu nutzen wird eine andere Kernreaktion untersucht:



Diese Reaktion hat einen sehr viel höheren Wirkungsquerschnitt als die pp-Reaktion. Die notwendigen Temperaturen erreicht man in Deuterium-

Tritium-Plasmen, die durch zahlreiche Methoden wie Wellenheizung oder dem Einschub von Neutralteilchen geheizt werden. Falls die Reaktion in einer ausreichenden Rate stattfindet, werden die erzeugten Neutronen an den Wänden des Plasmagefäßes eingefangen und setzen dort ihre Energie in Wärme um. Eine Abbildung des Torus-förmigen Plasmareaktors ITER ist in Abb. 3.52 gezeigt.



**Abbildung 3.52:** Kernfusionsexperiment ITER.

# Kapitel 4

## Teilchenphysik

Bislang betrachteten wir Neutronen, Protonen, Elektronen und Neutrinos als die elementaren Teilchen. Das anomale magnetische Moment von Proton und Neutron legen jedoch nahe, daß diese ihrerseits wiederum aus subnuklearen Teilchen zusammen gesetzt werden. Dies sei im folgenden diskutiert.

Man unterscheidet prinzipiell schwere und leichte Teilchen, die **Hadronen** und **Leptonen**. Hadronen sind zum Beispiel das Neutron und das Proton; Leptonen - das Elektron und das Neutrino. Die Hadronen werden weiter unterteilt in **Baryonen**, die einen halbzahligen Spin haben und **Mesonen** mit ganzzahligem Spin.

In Beschleunigerexperimenten wurden an die 100 neue Baryonen und Mesonen erzeugt. Ordnet man diese Teilchen ihrer Masse nach an, so erkennt man eine Häufung in drei Bereiche. Dies legte nahe, daß diese Baryonen und Mesonen aus elementaren Teilchen mit jeweils unterschiedlicher Masse zusammengesetzt sind. 6 Teilchen genügen, um durch jeweilige Kombinationen alle Baryonen und Mesonen zu beschreiben. Nach diesem sog. **Standardmodell** bestehen Baryonen aus 3 Quarks, während Mesonen aus Quark und Anti-quark bestehen. So setzt sich das Proton aus 2 up-Quarks (u) und einem down-Quark (d) zusammen, während das Neutron aus 1 up-Quark und zwei down-Quarks besteht. Nachdem die Ladung des up-Quarks  $+2/3$  und die des down-Quarks  $-1/3$  beträgt, bekommen Protonen (uud) die Ladung  $+1$  und die Neutronen (udd) die Ladung  $0$ .

## 4.1 Mesonen

### 4.1.1 $\pi$ -Mesonen, Pionen

Um die Wechselwirkung von Proton und Neutron untereinander zu beschreiben, gab es schon früh den Ansatz, dies als Austausch von einem Teilchen zu beschreiben. Bei der elektromagnetischen Wechselwirkung kann man die Streuung von zwei Elektronen untereinander als den Austausch eines virtuellen Photons darstellen, der von Elektron 1 abgegeben und nachfolgend von Elektron 2 wieder absorbiert wird. Dies läßt sich in sog. **Feynman-Graphen** darstellen, die Weg-Zeit Diagramme eines Vorgangs sind (siehe Abb. 4.1).

In Analogie zur elektromagnetischen Wechselwirkung sind **Mesonen** die Austauschteilchen der starken Wechselwirkung. Bei der Streuung eines Neutrons/Protons an einem Proton/Neutron tauschen sie ein Meson aus. Diese Mesonen bezeichnet man als  $\pi$ -Mesonen oder **Pionen**. Nachdem die Reichweite der starken Wechselwirkung auf den Kern beschränkt ist, kann man aus der Ausdehnung des Kerns die Masse des  $\pi$ -Mesons ableiten. Vorstellung ist hierbei, daß die Energieerhaltung wegen der Energieunschärfe für einen Zeitraum  $\Delta t$  verletzt werden kann. Für diesen Zeitraum kann die Energie in Ruhemasse umgewandelt werden, die zur Bildung des Austauschteilchens benötigt wird.

$$\Delta E \Delta t \geq \hbar \quad (4.1)$$

d.h ein Meson kann für kurze Zeit  $\Delta t$  gebildet werden.

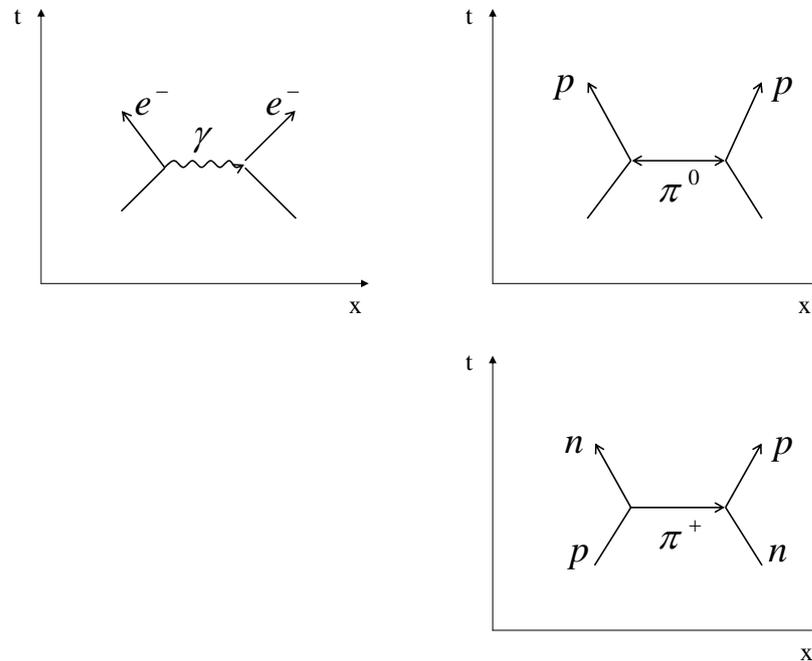
$$\Delta E = m_{\pi} c^2 \quad (4.2)$$

In dieser Zeit muß das Meson eine Entfernung entsprechend der Reichweite der starken Wechselwirkung durchfliegen können. Mit  $r \leq c \Delta t$  bekommt man:

$$r \leq r_0 = \frac{\hbar}{m_{\pi} c} \quad (4.3)$$

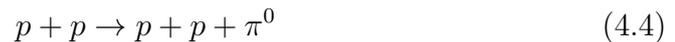
Die Masse für  $r_0 = 1.4 \cdot 10^{-15} m$  ist  $m_{\pi} c^2 = 139 \text{ MeV}$ . Das  $\pi$ -Meson kann in drei Ladungszuständen vorkommen  $\pi^0$ ,  $\pi^+$  und  $\pi^-$ . Ein  $\pi^0$  Meson beschreibt zum Beispiel die Streuung von zwei Neutronen oder zwei Protonen aneinander. Beim  $\pi^+$  und  $\pi^-$  Meson tauscht sich die Ladung der jeweiligen Streupartner Neutron/Proton aus (Abb. 4.1).

Noch vor der Entwicklung leistungsfähiger irdischer Beschleuniger wurde dieses Teilchen als Reaktionsprodukt der Höhenstrahlung nachgewiesen. In der oberen Atmosphäre fallen hochenergetische Teilchen auf dem Kosmos ein



**Abbildung 4.1:** Mesonen als Austauscheteilchen der starken Wechselwirkung.

und können dort Reaktionen auslösen. Bei Ballonversuchen 1947 konnte man folgende Reaktion beobachten:



Dieses  $\pi$ -Meson (Bsp.  $\pi^+$ -Meson) kann weiter zerfallen in:



Hierbei entstehen sog. **Myonen**, mittel schwere Leptonen, wie weiter unten noch gezeigt wird. Diese  $\mu$ -Teilchen können auch auf der Erde nachgewiesen werden, da sie innerhalb ihrer Lebensdauer die Atmosphäre durchdringen können. Myonen zerfallen weiter:



$\pi$ -Mesonen haben eine Reihe von Eigenschaften:

- **Ladung**

Zunächst treten  $\pi$ -Mesonen in drei Ladungszuständen auf: neutral, positiv und negativ geladen.

- **Lebensdauer**

Das  $\pi^0$ -Meson hat eine Lebensdauer von  $8.4 \cdot 10^{-17}$  s, während das  $\pi^+$  und  $\pi^-$  eine Lebensdauer von  $2.6 \cdot 10^{-8}$  s haben.

- **Spin**

Der Spin der Mesonen läßt sich aus der Zahl der Reaktionskanäle ablesen. Vergleicht man die zwei Reaktionen



so ist die Entartung der Endzustände von Reaktion 4.7 gegeben als  $(2I_{\pi^+} + 1)(2I_d + 1)$ , während die der Endzustände von Reaktion 4.8  $(2I_p + 1)(2I_p + 1)1/2$  ist (Faktor 1/2 da zwei identische Protonen gebildet werden). Das Verhältnis beider Wirkungsquerschnitte für die Reaktionen ist durch die Entartung der Endzustände gegeben. Man bekommt als Vorhersage  $3/2(2I_{\pi^+} + 1)$ . Dies ist im Einklang mit den Experimenten für den Fall, daß der Spin der  $\pi$ -Mesonen gleich Null ist.

- **Parität**

Die Parität von zwei Reaktionspartnern **A** und **B** ist durch die Eigenparität  $P_A$  und  $P_B$  mal der Parität des Bahndrehimpulses  $l$  der Relativbewegung gegeben:

$$P_{AB} = P_A P_B (-1)^l \quad (4.9)$$

Betrachten wir die Reaktion



Der Spin der Ausgangsprodukte ist  $I = 1$  ( $I_{\pi^-} = 0, I_d = 1$ ), der Bahndrehimpuls für die ruhenden Ausgangsprodukte  $l = 0$ . Damit wird der Gesamtdrehimpuls  $J = 1$ , der auch bei den Endprodukten erhalten sein muß.

Bei den beiden Neutronen kann der Spin parallel orientiert sein (symmetrische Spin-Wellenfunktion). Die Bahndrehimpuls-Quantenzahl der Relativbewegung der auseinander fliegenden Neutronen kann  $l = 0, 1, 2$  sein. Man bekommt die erlaubten Kombinationen ( $J = 1$  mit  $I =$

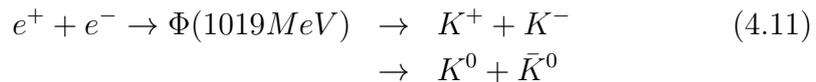
1;  $l = 0$  und  $I = 1$ ;  $l = 1$  und  $I = 1$ ;  $l = 2$ ). Allerdings liefert nur die Kombination mit  $l = 1$  eine anti-symmetrische Ortswellenfunktion, die mit der symmetrischen Spin-Wellenfunktion eine anti-symmetrische Gesamtwellenfunktion ergibt. Demnach muß der Endzustand zu  $I = 1$  und  $l = 1$  gehören.

Bei Neutronen mit anti-paralleler Spinorientierung wäre die Spinwellenfunktion anti-symmetrisch. Mit  $I = 0$  und  $J = 1$  muß der Bahndrehimpuls  $l = 1$  sein. Damit ist die Ortswellenfunktion antisymmetrisch und die Gesamtwellenfunktion der beiden Neutronen symmetrisch. Dies ist nicht zulässig.

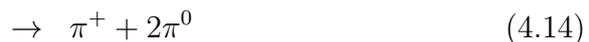
Mit  $I = 1$  und  $l = 1$  ist die Parität des Endzustandes gemäß Gl. 4.9 negativ. Nachdem das Deuteron auf der linken Seite von Reaktion 4.10 positive Eigenparität hat, muß das Meson selbst eine negative Parität haben.

### 4.1.2 K-Mesonen, Kaonen

Neben den  $\pi$ -Mesonen wurden zusätzlich noch K-Mesonen in hochenergetischen  $e^+e^-$ -Stößen entdeckt. Bei  $e^+e^-$  Reaktionen beobachtet man Resonanzen bei bestimmten Energien. Dies ist gleich bedeutend mit der Bildung eines Teilchens, daß eine Ruhemasse entsprechend der Energie der **Resonanz** besitzt. Dieses Teilchen kann dann weiter zerfallen. Ein solche Resonanz ist die  $\Phi$ -Resonanz bei 1019 MeV:



Das  $\Phi$ -Teilchen zerfällt in K-Mesonen. Diese K-Mesonen ihrerseits zerfallen wiederum in  $\pi$ -Mesonen gemäß:



Nachdem die Parität der  $\pi$ -Mesonen negativ ist, erkennt man sofort, daß die Parität keine Erhaltungsgröße des Zerfalls von K-Mesonen ist. Damit zerfallen K-Mesonen nach der schwachen Wechselwirkung, obwohl sie in einer Reaktion der starken Wechselwirkung gebildet wurden (in den  $e^+e^-$ -Stößen

werden direkt Quark und Anti-quark gebildet, die per starker Wechselwirkung binden). Diese besondere Eigenschaft bezeichnet man als **Seltsamkeit S**. Diese ändert sich wie folgt:

$$\Delta S = 0 \quad \text{starke Wechselwirkung} \quad (4.15)$$

$$\Delta S = \pm 1 \quad \text{schwache Wechselwirkung} \quad (4.16)$$

## 4.2 Baryonen

Baryonen sind schwere Teilchen mit halbzahligen Spin. Bei Reaktionen von Baryonen untereinander gelten folgende Erhaltungsgrößen: (i) Baryonenzahl **B**, (ii) Seltsamkeit **S**, (iii) Ladung **Q** und (iv) Isospin-z-Komponente  $T_z$ .

Nach der Erhaltung der Baryonenzahl ist der Zerfall eines Protons zum Beispiel nicht erlaubt, da es leichtere Baryonen nicht gibt. Nach dem Standardmodell bestehen Baryonen aus 3 Quarks, die nicht unter Vernichtung dieser Quarks zerfallen können, die schwache Wechselwirkung führt immer nur zu einer Umwandlung von Quarks. Dies ist im Unterschied zu Mesonen, die aus Quark und Anti-quark bestehen. Diese können über die schwache Wechselwirkung in Leptonen zerfallen.

Für die Quantenzahlen der Baryonen besteht der Zusammenhang gemäß:

$$Q = \frac{1}{2}(B + S) + T_z \quad (4.17)$$

Dies sei am Beispiel des  $\pi^-$ -Mesons illustriert: mit  $Q = -1$ ,  $B = 0$  und  $S = 0$  ergibt sich  $T_z = -1$ .

## 4.3 Leptonen

Leptonen sind leichte Teilchen. Sie sind durch die Leptonenzahl charakterisiert, die positiv für Teilchen und negativ für Anti-Teilchen ist. Das Myon und Tauon sind entsprechend schwerer als die Elektronen und besitzen entsprechende Myon- und Tauon-Neutrinos. Die Leptonen mit ihren Massen und Lebensdauern sind in Tab. 4.1 gezeigt.

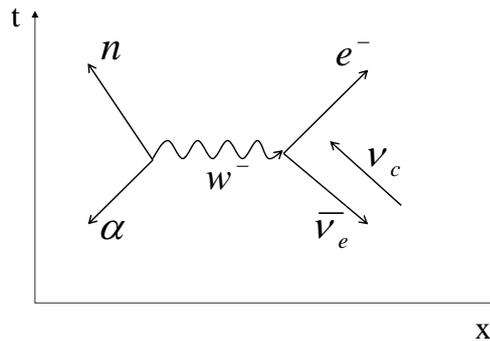
Nach dem Standardmodell ist die schwache Wechselwirkung gleichbedeutend mit der direkten Umwandlung eines Quarks. Damit ist die Reichweite der schwachen Wechselwirkung von der Größenordnung der Ausdehnung eines einzelnen Quarks von ca.  $2 \cdot 10^{-18}$  m. Die schwache Wechselwirkung kann man als den Austausch von Austauschteilchen beschreiben. Dies sind die  $W^+$  und  $W^-$  Bosonen bzw.  $Z^0$ -Bosonen

	$e^-$	$\mu^-$	$\tau^-$	$\nu_e$	$\nu_\mu$	$\nu_\tau$
Spin	1/2	1/2	1/2	1/2	1/2	1/2
Lebensdauer	$\infty$	$2.2 \cdot 10^{-6}\text{s}$	$3 \cdot 10^{-12}\text{s}$	$\infty$		
Ladung Q	-1	-1	-1	0	0	0
Masse (MeV)	0.511	105	1777			
Masse (eV)				$< 10^{-5}$	$< 0.25$	$< 35$

Tabelle 4.1: Leptonen.

- **W-Bosonen**

Der Zerfall des Neutrons kann als Austausch eines  $W^-$  Bosons angesehen werden, wie in Abb. 4.2 verdeutlicht ist. Hierbei findet die Reaktion statt:



**Abbildung 4.2:** W-Bosonen als Austauschteilchen der schwachen Wechselwirkung.

$$n \rightarrow p + e^- + \bar{\nu}_e \quad (4.18)$$

In dem Feynman-Diagramm läuft das Antiteilchen rückwärts in der Zeit, so daß die entstehenden Teilchen in Abb. 4.2 immer von der Reaktion weglaufen<sup>1</sup>. Tauscht man Anti-Neutrino gegen ein Neutrino aus, so läuft dieses in der Zeit vorwärts (siehe Abb. 4.2). Dies entspricht der Reaktion:

$$\nu_e + n \rightarrow p + e^- \quad (4.19)$$

<sup>1</sup>wie bei den Kirchhoff'schen Knotenregeln in der Elektrotechnik.

1. Familie	2. Familie	3. Familie
$e^-$	$\mu^-$	$\tau^-$
$\nu_e$	$\nu_\mu$	$\nu_\tau$
u	s	b
d	c	t

**Tabelle 4.2:** System aus drei Leptonen- und drei Quark-Familien

D.h. Neutron und Elektron-Neutrino stoßen und bilden ein Proton und ein Elektron.

Im Quark-Modell (siehe unten) ist dieser Prozeß gleichbedeutend mit der Umwandlung eines **d**-Quarks in ein **u**-Quark. Dies geschieht innerhalb eines einzelnen Quarks (!) und begründet damit die kurze Reichweite der Wechselwirkung.

$$n(udd) \rightarrow p(uud) + e^- + \bar{\nu}_e \quad (4.20)$$

- **Z-Bosonen**

Bei Prozessen der schwachen Wechselwirkung, bei denen sich die Ladung nicht ändert, werden neutrale  $Z^0$  Bosonen ausgetauscht:

$$\tau^- \rightarrow \mu^- + \bar{\nu}_\mu + \bar{\nu}_\tau \quad (4.21)$$

In  $e^- + e^+$ -Stößen wurden bei hohen Energien  $Z^0$  Bosonen erzeugt. Aus der Breite der Resonanz wurde die Anzahl der möglichen Zerfallskanäle abgeschätzt. Daraus ließ sich schließen, daß es nur drei Familien von Leptonen gibt den Elektronen, Myonen, und Tauonen. Dies wurde gleichzeitig als Indiz dafür verstanden, daß es auch bei den Quarks nur drei Familien gibt, entsprechend den **ud**-, **sc**- und **bt**-Quarks (siehe Tab. 4.2). Der experimentelle Nachweis steht allerdings noch aus.

Die Massen dieser Austauscheteilchen lassen sich wieder aus der Reichweite der schwachen Wechselwirkung ableiten. Man bekommt für die W-Bosonen ein Masse von 80 GeV und für Z-Bosonen eine Masse von 91.19 GeV.

## 4.4 Standard-Modell

Mit der Entwicklung immer leistungsfähigerer Beschleuniger wurde die Zahl der gefundenen Elementarteilchen immer größer. Aus der Übersicht dieser

	u	d	s	c	b	t
Spin I	1/2	1/2	1/2	1/2	1/2	1/2
Isospin T	1/2	1/2	0	0	0	0
z-Komponente Isospin $T_z$	1/2	-1/2	0	0	0	0
Ladung Q	2/3	-1/3	-1/3	2/3	-1/3	1/3
Baryonenzahl B	1/3	1/3	1/3	1/3	1/3	1/3
Seltsamkeit S	0	0	-1	0	0	0
Charm C	0	0	0	1	0	0
Colour	rgb	rgb	rgb	rgb	rgb	rgb
Masse (GeV)	0.006	0.01	0.15	1.5	4.5	178

**Tabelle 4.3:** Quarks mit ihren Quantenzahlen. Bei den Anti-Teilchen dreht sich das Vorzeichen von  $T_z$ ,  $Q$ ,  $B$  und  $S$  um.

Teilchen entwickelte sich die Vorstellung, daß diese Elementarteilchen wiederum aus kleineren Teilchen zusammengesetzt seien. Diese subnuklearen Teilchen sind die **Quarks**.

Die innere Struktur von Proton und Neutron wurde motiviert durch Streuexperimente, die auf punktförmige Ladungen innerhalb des Atomkerns schließen ließen. Zudem sind die anomalen g-Faktoren von Neutron und Proton Hinweis auf deren innere Struktur.

### 4.4.1 Quarks

#### Klassifikation der Quarks

Bei der Beschreibung der Elementarteilchen mit Quarks, sind Baryonen jeweils aus drei Quarks zusammen gesetzt, während die Mesonen jeweils aus Quark und Anti-Quark zusammen gesetzt sind. Die Bausteine im Quark-Modell sind das up-, down, strange, charm, bottom und top-Quark. Ihre Eigenschaften sind in Tab. 4.3 zusammen gefasst.

Der Aufbau der einzelnen Teilchen aus diesen Quarks sei an zwei Beispielen illustriert:

- **$\pi$ -Mesonen im Quark-Modell**

Bei den Mesonen verbinden sich Quark und Anti-Quark. Bei  $\pi$ -Mesonen sind das jeweils ein  $u$  und ein  $d$ -Quark. Das  $\pi^0$ -Meson ist eine Überlagerung von  $u\bar{u}$  und  $d\bar{d}$ .

$$\pi^+ = (u\bar{d}) \quad Q = 1 \quad T_z = 1 \quad (4.22)$$

$$\pi^0 = \frac{1}{\sqrt{2}}(u\bar{u} + d\bar{d}) \quad Q = 0 \quad T_z = 0 \quad (4.23)$$

$$\pi^- = (\bar{u}d) \quad Q = -1 \quad T_z = -1 \quad (4.24)$$

$$(4.25)$$

### • Proton/Neutron im Quark-Modell

Bei Neutron und Proton koppeln jeweils 3 Quarks:

$$p = (uud) \quad Q = 1 \quad T_z = 1/2 \quad (4.26)$$

$$n = (udd) \quad Q = 0 \quad T_z = -1/2 \quad (4.27)$$

Die Quantenzahlen der einzelnen Quarks sind über

$$Q = \frac{1}{2}(B + U + D + S + C) \quad (4.28)$$

untereinander verknüpft. Hierbei bezeichnet  $U = n_u - n_{\bar{u}}$  und  $D = n_d - n_{\bar{d}}$  jeweils die Differenz der Anzahl von Quark und Anti-Quark für  $u$  und  $d$ -Quarks.

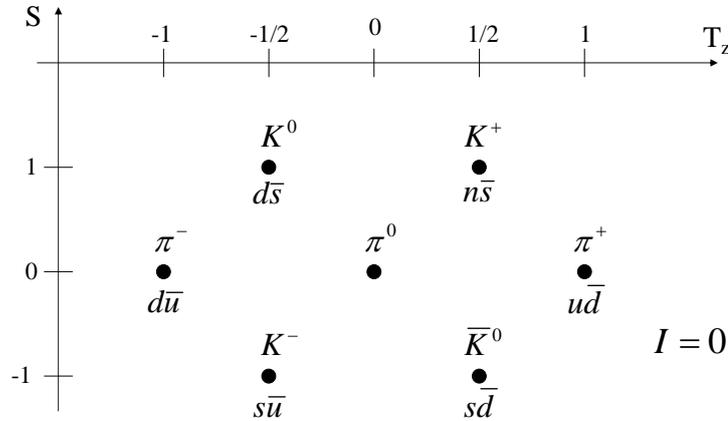
Auf der Basis der Eigenschaften der einzelnen Quarks lassen sich jetzt die beobachteten Elementarteilchen zusammensetzen. Dies gelingt, wenn man bei den Baryonen drei Quarks kombiniert und bei den Mesonen Quark und Anti-Quark. Eine weitere Besonderheit ist der Umstand, daß es nur Teilchen mit einer *symmetrischen* Wellenfunktion gibt (zusammengesetzt aus Spin-Anteil und Ortsanteil). Dies ist zunächst im Widerspruch zum Pauli-Verbot. Die Konstruktion der Teilchen wird im folgenden diskutiert.

### Mesonen als $q\bar{q}$ -Teilchen

Bei den Mesonen aus Quark und Anti-Quark kann man je nach Kopplung ein Teilchen zu  $I = 0$  und  $I = 1$  erzeugen, wobei  $I = 0$  der energetisch günstigere Grundzustand ist. Betrachtet man die möglichen Kombinationen von Quark und Anti-Quark, so erkennt man, daß es acht Möglichkeiten mit Spin  $I = 0$  gibt, ein Mesonen-Oktett. Hierzu wird die z-Komponente des Isospins  $T_z$  gegenüber der Seltsamkeit  $S$  aufgetragen wie in Abb. 4.3 illustriert.

Für den Zustand zu den Mesonen zu  $T_z=0$  und  $S = 0$  existieren drei Möglichkeiten:

$$\pi^0 \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(u\bar{u} + d\bar{d}) \quad (4.29)$$



**Abbildung 4.3:** Das Mesonen-Oktett entspricht 8 Teilchen, wobei das Antiteilchen ( $\bar{K}^0$ ) kein neues Teilchen ist.

$$\eta' \rightarrow \frac{1}{\sqrt{3}}(u\bar{u} + d\bar{d} + s\bar{s}) \quad (4.30)$$

$$\eta^0 \rightarrow \frac{1}{\sqrt{6}}(2s\bar{s} - u\bar{u} - d\bar{d}) \quad (4.31)$$

$$(4.32)$$

Ein entsprechendes Oktett existiert auch für Mesonen mit Spin  $I = 1$ . Diese entsprechen angeregten Zuständen der  $I = 0$  Mesonen.

### Baryonen als $qqq$ -Teilchen

Bei Baryonen kann man die Spins zu  $I = 1/2$  oder zu  $I = 3/2$  koppeln. Für Spin  $I = 1/2$  Baryonen bekommen wir wieder ein Baryonen-Oktett, wie in Abb. 4.4 illustriert.

Man erkennt an diesem Oktett, daß die Teilchen  $uuu$ ,  $ddd$  und  $sss$  für  $I = 1/2$  nicht existieren. Dies erklärt sich wie folgt: Für  $I = 1/2$  ist die Spinwellenfunktion antisymmetrisch, die Ortswellenfunktion wäre allerdings symmetrisch, da bei einer Vertauschung von zwei Quarks in  $uuu$  das Teilchen dasselbe wäre. Demnach wird die Gesamtwellenfunktion anti-symmetrisch. Dies ist anscheinend nicht zulässig.

Wenn die Quarks zu einem Gesamtspin  $I=3/2$  koppeln, erhält man ein Dekuplett wie in Abb. 4.5 skizziert. Man erkennt am Dekuplett, daß die Teilchen  $uuu$ ,  $ddd$  und  $sss$  für  $I = 3/2$  existieren, da jetzt die Spinwellenfunktion als auch die Ortswellenfunktion symmetrisch sind.

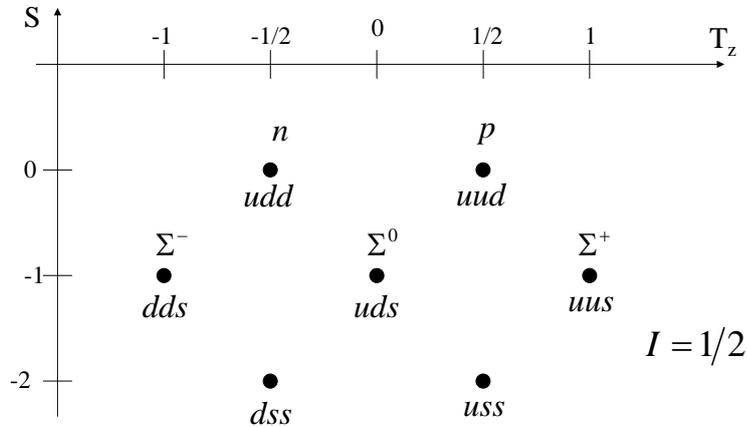


Abbildung 4.4: Baryonen-Oktett für  $I = 1/2$ .

Bei der Aufstellung des Baryonen-Oktetts und -Dekupletts haben wir angenommen, daß es nur Teilchen mit symmetrischer Gesamtwellenfunktion gibt. Dies wäre nach dem Pauliverbot nicht zulässig sei. Um das Pauliprinzip allerdings zu erhalten, wurde postuliert, daß sich die Quarks noch durch eine neue Eigenschaft der **Farbe** unterscheiden lassen. Für diese neue Quantenzahlen herrscht allerdings die Einschränkung, daß nur diejenigen Kombination erlaubt sind, die im Sinne einer Farbmischung wieder weiß ergeben (d.h. rot, grün und blau). Bei Mesonen ist das eine entsprechende Kombination aus Farbe und Anti-Farbe.

#### 4.4.2 Gluonen

Bislang wurde ein Modell konstruiert, was die Existenz von Quarks voraussetzte und nur Teilchen zuließ, die entweder aus drei Quarks (Baryonen) oder aus Quark und Anti-Quark (Mesonen) bestanden. Dieses Modell läßt zunächst einige Fragen offen:

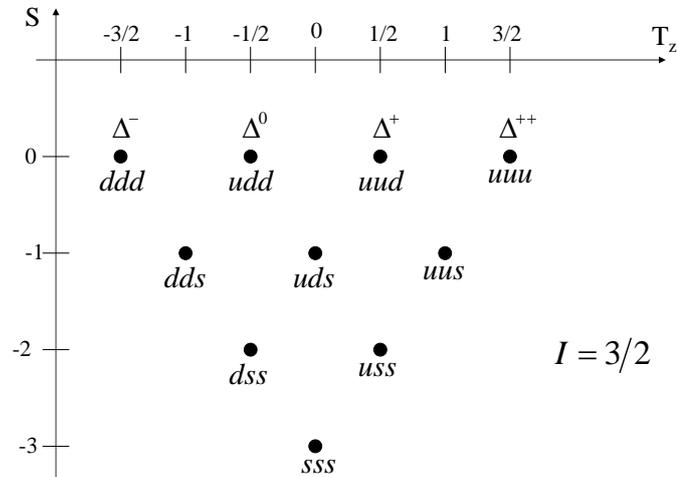
- **einzelne Quarks ?**

Warum treten Quarks nicht einzeln auf ? Wieso gibt es keine Teilchen, die aus 4 Quarks bestehen ?

- **Umwandlung Lepton - Hadron**

Wie ist es möglich, daß aus Leptonen Hadronen gebildet werden ?

- **Was bedeutet die Farbladung ?**



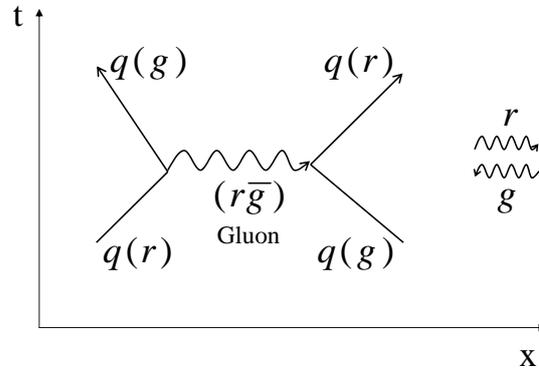
**Abbildung 4.5:** Das Baryonen-Dekuplett für  $I = 3/2$  entspricht 10 Teilchen.

Warum ist die Kombination aus Orts- und Spinanteil eine symmetrische Wellenfunktionen für das Teilchen, die erst durch die hypothetische unterschiedliche Farbe anti-symmetrisch wird?

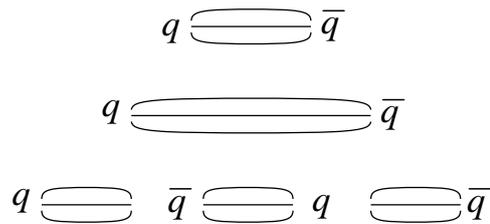
Diese Fragen lassen sich durch die Austauschteilchen der Wechselwirkung der Quarks untereinander verstehen (Mesonen waren die Austauschteilchen der Wechselwirkung von Baryonen untereinander). Diese Austauschteilchen einzelner Quarks untereinander bezeichnet man als Gluonen. Sie bestehen aus zwei Farben, einer Farbe und einer Anti-Farbe. Streuen nun zwei Quarks aneinander, so tauschen sie ein Gluon aus und ändern dabei ihre Farbe. Diese Farbänderung geschieht in der Weise, daß die Quarkmischung als solches wieder weiß ergibt. Dies ist in Abb. 4.6 verdeutlicht.

Bei der Beschreibung der Wechselwirkung von Quarks untereinander erkennt man, daß die anziehende Wirkung mit zunehmendem Abstand nicht abnimmt sondern konstant bleibt. Damit steigt die potentielle Energie mit zunehmendem Abstand bis zu einer Entfernung, an der spontan neue Quarks gebildet werden können, wie in Abb. 4.7 illustriert. Es bildet sich spontan ein neues Quark und ein Anti-Quark, ein Meson. Damit lassen sich zwei Quarks nicht voneinander trennen, ohne das dadurch Mesonen gebildet werden. Demnach beobachtet man beim Zusammenstoß von Baryonen die Bildung von einer großen Zahl von Mesonen.

Auf der Basis der Gluonen läßt sich auch die starke Wechselwirkung neu interpretieren. Innerhalb eines Nukleons wechselwirken die Quarks unterein-



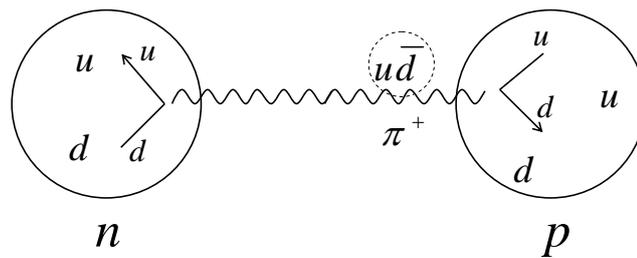
**Abbildung 4.6:** Gluonen als Austauscheteilchen der Wechselwirkung zwischen Quarks.



**Abbildung 4.7:** Trennt man zwei Quarks so wird aus dem Gluonenfeld spontan ein Quark Antiquark-Paar gebildet.

ander, dabei tauschen sie Gluonen aus. Wird dabei die Entfernung zwischen zwei Quarks zu groß, so wird spontan ein Quark/Anti-Quarkpaar gebildet. Dies ist in Abb. 4.8 veranschaulicht

Bei der starken Wechselwirkung ändert sich somit die Farbe eines einzelnen Quarks, während sich bei der schwachen Wechselwirkung der Quarktyp ändert.



**Abbildung 4.8:** Im Gluonenfeld der Quark-Wechselwirkung können Quark-Anti-Quark Paare gebildet werden. Diese bilden die Mesonen, die für die starke Wechselwirkung verantwortlich sind.

# Kapitel 5

## Fragenkatalog

### 5.1 Kapitel 1: Statistik

- Beschreiben Sie die Maxwell-Boltzmann, Fermi-Dirac und Bose-Einstein Verteilung ? Wie leitet man sie ab?
- Was ist die Zustandssumme ?
- Was ist die Zustandsdichte und wie berechnet man sie ?
- Wie ist die Verbindung zwischen Gesamtenergie  $U$  und Zustandssumme  $Z$  ?
- Wie ist die Entropie definiert ?
- Wie stehen die Größen Entropie, Gesamtenergie und Temperatur im Zusammenhang ?
- Was ist die Fermienergie ?
- Wann gilt die klassische Statistik, wann die Quantenstatistik ?

### 5.2 Kapitel 2: Festkörper

- Welche Kristallsymmetrien kennen Sie?
- Was ist Braggbedingung ?
- Was ist der reziproke Raum und wie formuliert man damit die Beugungsbedingung ?

- Was beschreibt die Ewald-Kugel ?
- Welche Beugungsmethoden zur Strukturaufklärung kennen Sie?
- Was beschreibt die Dispersion einer Welle ?
- Wie unterscheiden sich optische und akustische Phononen ?
- Wie ist der prinzipielle Verlauf der spezifischen Wärme mit der Temperatur eines Festkörpers ?
- Wie funktioniert die Mößbauer-Spektroskopie ?
- Beschreiben sie die Eigenschaften eines freien Elektronengases.
- Wie ist der Beitrag der freien Elektronen zur spezifischen Wärme eines Kristalls ?
- Wie ergibt sich die elektrische und thermische Leitfähigkeit eines Metalls ?
- Wie entsteht die Bandlücke ?
- Wie geht man bei Bandstruktur-Rechnungen vor ?
- Wie ergeben sich aus der Bandstruktur Metalle und Isolatoren ?
- Was ist ein Halbleiter ?
- Was ist ein pn-Übergang ?
- Erklären sie Funktionsweise einer pn-Diode und einer Solarzelle.
- Beschreiben sie die Supraleitung phänomenologisch.
- Wie unterscheiden sich Supraleiter 1. und 2. Art und warum ?
- Beschreiben sie anschaulich die Josephson Effekte.
- Unterscheiden Sie Dia-, Para- und Ferromagnetismus ?
- Wie entsteht der Diamagnetismus ?
- Wie funktioniert die adiabatische Entmagnetisierung ?
- Was ist die Curie-Temperatur ?
- Was sind magnetische Domänen ?

## 5.3 Kapitel 3: Kernphysik

- Wie bestimmt man die Ladungs- und Masseverteilung im Atomkern ?
- Was ist der Formfaktor ?
- Was sind Isotope, Isobare, Isotone ?
- Wie ist die Reichweite der starken Wechselwirkung ?
- Wie ist das magnetische Moment des Protons und des Neutrons und wie mißt man es ?
- Wie funktioniert die Methode der Kernspinresonanz ?
- Wie ist der Verlauf der Bindungsenergie pro Nukleon?
- Was ist das Tröpfchenmodell ? Wie entsteht das Maximum bei  $A=57$  ?
- Erklären sie phänomenologisch das Schalenmodell.
- Welche Arten von Zerfällen gibt es ?
- Warum ist die Reichweite der  $\alpha$ -Teilchen umgekehrt proportional zur Lebensdauer ?
- Warum entstehen beim  $\alpha$ -Zerfall genau Heliumkerne ?
- Was sind Neutrinos und warum wurden sie eingeführt ?
- Wie werden Neutrinos nachgewiesen ?
- In welchen Einheiten wird radioaktive Strahlung gemessen ?
- Beschreiben Sie Methoden für Linear-Beschleuniger.
- Beschreiben Sie Methoden für Kreis-Beschleuniger.
- Wie funktioniert eine Ionisationskammer ?
- Wie funktioniert ein Szintillationszähler ?
- Welche Energieverlust-Mechanismen von Teilchen in Materie kennen sie ?
- Welche Energieverlust-Mechanismen von Photonen in Materie kennen sie ?

- Welche Erhaltungsgrößen bei Kernreaktionen kennen sie ?
- Wie funktioniert ein Spaltungsreaktor ?
- Welche Fusionsreaktionen kennen sie ?

## 5.4 Kapitel 4: Teilchenphysik

- Unterscheiden sie Hadronen, Leptonen, Baryonen und Mesonen ?
- Was sind Quarks und welche gibt es ?
- Welche Eigenschaften haben Mesonen ?
- Welche Leptonen gibt es ?
- Beschreiben sie die schwache Wechselwirkung im Quark-Modell.
- Wie trifft man eine Vorhersage für die Masse eines Austauschteilchens ?
- Welche Quantenzahlen benutzt man in der Teilchenphysik ?
- Beschreiben sie starke Wechselwirkung im Quarkbild.

# Anhang A

## Formelsammlung

Ensemble Teilchenzahl

$$N = n_1 + n_2 + \dots = \sum_i n_i$$

Ensemble Gesamtenergie

$$U = n_1 E_1 + n_2 E_2 + \dots = \sum_i n_i E_i$$

Wahrscheinlichkeit einer Verteilung (klassisch)

$$p = \prod_i \frac{g_i^{n_i}}{n_i!}$$

Zustandssumme

$$Z = \sum_i g_i e^{-\beta E_i}$$

innere Energie

$$U = -\frac{N}{Z} \frac{\partial}{\partial \beta} Z = -N \frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z$$

Definition  $\beta$  in der Statistik

$$k_B T = \frac{1}{\beta}$$

Maxwell-Boltzmann Statistik

$$n_i = \frac{N}{Z} g_i e^{-\frac{E_i}{k_B T}}$$

Zustandssumme ideales Gas

$$Z = V \frac{(2\pi m k_B T)^{3/2}}{h^3}$$

Wahrscheinlichkeit einer Verteilung (Fermi Dirac)

$$p = \prod_i \frac{g_i!}{n_i! (g_i - n_i)!}$$

Fermi-Dirac Statistik

$$n_i = \frac{g_i}{e^{\frac{E_i - E_F}{k_B T}} + 1}$$

Zustandsdichte freies Elektronengas

$$g(E) = \frac{8\pi V}{h^3} E^{1/2} (2m^3)^{1/2}$$

Bose-Einstein Statistik	$n_i = \frac{g_i}{e^{\alpha + \beta E_i} - 1}$
Bragg-Bedingung im reziproken Raum	$\Delta \vec{k} = \vec{G}$
Umrechnung realer Raum ( $\vec{a}$ ) in den reziproken Raum ( $\vec{b}$ )	$\vec{b}_i = 2\pi \frac{\vec{a}_j \times \vec{a}_k}{\vec{a}_i (\vec{a}_j \times \vec{a}_k)}$
molare Wärmekapazität eines Festkörpers	$C_V = 3N_A k_B = 3R$
Wärmekapazität bei konst. Volumen	$C_V = \frac{\partial U}{\partial T}$
Fermienergie freies Elektronengas	$E_F = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{3\pi^2 N}{V} \right)^{2/3}$
Fermigeschwindigkeit	$v_F = \frac{\hbar k_F}{m} = \frac{\hbar}{m} \left( \frac{3\pi^2 N}{V} \right)^{1/3}$
spezifische Wärme bei tiefen Temperaturen	$C_V = \underbrace{\gamma T}_{\text{elektronisch}} + \underbrace{AT^3}_{\text{phononisch}}$
Stoßzeit, freie Weglänge und Fermigeschwindigkeit	$\tau = \frac{\lambda}{v_F}$
Ohm'sches Gesetz	$j = nev_D = n \frac{e^2}{\underbrace{m}_{\sigma}} \tau E$
Wiedemann-Franz-Gesetz für das Verhältnis therm./elektr. Leitfähigkeit	$\frac{\kappa}{\sigma} = \frac{\pi^2}{3} \left( \frac{k_B}{e} \right)^2 T$
Hauptgleichung Bandstrukturrechnung	$(\lambda_k - E)c_k + \sum_G V_G c_{k-G} = 0$
effektive Masse	$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{dk^2}$
Produkt aus Elektronen- und Löcherdichte	$np = 4 \left( \frac{k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^3 (m_e^* m_h^*)^{3/2} e^{-\frac{E_g}{k_B T}}$

Fermienergie intrinsischer Halbleiter			$E_F = \frac{1}{2}(E_c + E_v) + \frac{3}{4}k_B T \ln \frac{m_h}{m_e}$
Elektronendichte dotierter Halbleiter			$n = 2 \underbrace{\left( \frac{m_e^* k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2}}_{n_0} e^{-\frac{E_C - E_F}{k_B T}}$
Fermienergie extrinsischer Halbleiter			$E_F = \frac{1}{2}(E_D + E_c) + \frac{1}{2}k_B T \ln \left( \frac{N_D}{2n_0} \right)$
Leitfähigkeit			$\sigma = \frac{ne^2}{m_e^*} \tau_e + \frac{pe^2}{m_h^*} \tau_h$
Radius Atomkern			$R_k = r_0 \sqrt[3]{A} \quad r_0 = 1.3 \text{ fm}$
Blochgleichung Komponente	NMR	z-	$\frac{dM_z}{dt} = \gamma \left( \vec{M} \times \vec{B} \right)_z + \frac{M_0 - M_z}{T_1}$
Blochgleichung Komponente	NMR	x-	$\frac{dM_x}{dt} = \gamma \left( \vec{M} \times \vec{B} \right)_x - \frac{M_x}{T_2}$
Blochgleichung Komponente	NMR	y-	$\frac{dM_y}{dt} = \gamma \left( \vec{M} \times \vec{B} \right)_y - \frac{M_y}{T_2}$
Massendefekt			$M_K = \sum m_p + \sum m_n - \Delta M \quad \Delta M = \frac{E_B}{c^2}$
Bethe-Weizsäcker-Formel			$E_B = a_v A - a_s A^{2/3} - a_f \frac{(Z - \frac{A}{2})^2}{4A} - a_c Z^2 A^{-1/3} + \delta a_p A^{-1/2}$
Zerfallsgesetz			$\frac{dN}{dt} = -\lambda N = -A(t)$ $N(t) = N_0 e^{-\lambda t} = N_0 e^{-\frac{t}{\tau}}$
Gamow-Faktor			$G = \frac{2\sqrt{2m}}{\hbar} \int_{r_1}^{r_2} \sqrt{\left( \frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0 r} - E \right)} dr$
rel. Energie-Impulsbeziehung			$E = \sqrt{p_e^2 c^2 + (m_e c^2)^2} = E_e + m_e c^2$
re. Massenzunahme			$m = m_0 \frac{1}{\sqrt{1 - \beta^2}} \quad \beta = \frac{v}{c}$
Zyklotronfrequenz			$\omega_c = \frac{v_{\perp}}{R} = \frac{ZeB}{m}$
Bethe-Bloch Formel			$\frac{dE}{dx} = -\frac{Z^2 e^4}{4\pi\epsilon_0^2} \frac{n_e}{m_e v^2} \ln \frac{2m_e v^2}{\langle I \rangle}$



# Index

- $\beta$ -Endpunkt-Spektroskopie, 156
- 90°-Puls, 130
- adiabatische Entmagnetisierung, 113
- Aktivität, 147
- Anreicherung, 186
- Atomuhr, 128
- Bandlücke, 61
- Baryonen, 194
- Baryonen-Dekuplett, 204
- Baryonen-Oktett, 204
- Bethe-Bloch-Formel, 174
- Bethe-Weizsäcker-Formel, 139
- Bethe-Weizsäcker-Zyklus, 192
- Blaskammer, 181
- Bloch-Funktionen, 60
- Bloch-Gleichungen, 130
- Bloch-Wände, 118
- Bragg-Bedingung, 26
- Bragg-Peak, 175
- Brillouin-Zone, 33
- Cerenkov-Detektor, 181
- Compound-Kern, 183
- Compton-Effekt, 176
- Curie-Gesetz, 113
- Curie-Weiss-Gesetz, 117
- Debye-Scherrer-Verfahren, 35
- Debye-Temperatur, 47
- Debye-Waller-Faktor, 36
- Definition Temperatur, 10
- Dispersion, 39
- Drehkristall-Methode, 34
- effektive Masse, 67, 69
- Einheiten
  - Becquerel, Curie, Gray, Sievert, rem, 149
- Einheitszelle, 24
- endotherm, 184
- Energie
  - Asymmetrie, Fermigas, 135
  - Coloumb, 137
  - Oberflächen, 134
  - Paarungs, 138
  - Volumen, 134
- Energieverlust
  - elektronisch, 172
  - nuklear, 175
- Entartung, 15
- Entropie, 7, 13
- Ewald-Konstruktion, 29
- exotherm, 184
- Fermienergie, 17
- Fermifläche, 55
- Feynman-Graph, 195
- Formfaktor, 122
- Fusionsreaktor, 193
- g-Faktor, 126
- Gamow-Faktor, 150
- Geiger-Müller-Zählrohr, 179
- Geiger-Nuttal-Regel, 150
- gg/uu/ug-Kerne, 138
- Gitter-Basis, 25
- Gittertypen, 24
- Gittervektor

- realer Raum, 23
- Gittervektoren
  - reziproker Raum, 28
- Gluonen, 205
- Grenzflächenzustände, 68
- Haas-van Alphen Effekt, 108
- Hadronen, 194
- Halbleiter
  - direkt-indirekt, 71
- Halbleiter-Detektor, 179
- Halbwertszeit, 147
- Hauptgleichung, 64
- Hyperfeinstruktur, 126
- ideales Gas, 13
- Ionisations-Kammer, 178
- Isobar, 124
- Isobare, 124
- Isotone, 124
- Isotop, 124
- K-Einfang, 147
- Kaskaden-Schaltung, 164
- Kernfusion, 133, 190
- Kernmagneton, 126
- Kernreaktor, 186
- Kernspaltung, 133
- Kernspinresonanz, 129
- Kettenreaktion, 186
- Landau-Diamagnetismus, 103
- Landau-Niveau, 105
- Larmorfrequenz, 101
- Laue-Verfahren, 34
- Lebensdauer, 147
- Leitfähigkeit
  - elektrisch, 56
  - thermisch, 58
- Lennard-Jones-Potential, 37
- Leptonen, 194
- Mößbauer-Spektroskopie, 50
- Madelung-Konstante, 38
- magische Zahlen, 140
- magnetische Permeabilität, 102
- Magnetisierung, 102
- Magnetismus
  - Dia-, 100
  - Domänen, 118
  - Ferro-, 117
  - Para-, 111
  - Pauli-Spin-, 115
- Mesonen, 194
  - $\pi$ , 195
  - K, 198
- Mesonen-Oktett, 203
- Moderator, 186
- Myonen, 196
- Nebelkammer, 181
- Neutrino-Masse, 191
- Neutron, 124
- parabolische Bandnäherung, 67
- Parität, 184
- Phasenraum, 11
- Phononen
  - akustisch, 41
  - optisch, 43
  - Quantisierung, 44
- Planck'sches Strahlungsgesetz, 21
- Proportional-Zählrohr, 178
- Quanten-Halleffekt, 109
- Quarks, 202
- Rabi-Experiment, 126
- reduziertes Zonenschema, 62
- Relaxation
  - longitudinal, 130
  - transversal, 130
- Resonanz, 198
- Seltsamkeit, 199

- spezifische Wärme
  - Debye-Modell, 47
  - Einstein-Modell, 48
  - Elektronen, 55
- Spin-Bahn-Kopplung, 141
- Spin-Echo-Verfahren, 131
- spontane Spaltung, 185
- SQUID, 99
- Statistik
  - Bose-Einstein, 20
  - Fermi-Dirac, 17
  - Maxwell-Boltzmann, 11
- stochastische Kühlung, 170
- Strahlung
  - $\alpha$ , 146
  - $\beta^+$ , 146
  - $\beta^-$ , 146
  - $\gamma$ , 147
- Strukturfaktor, 32
- Synchrotron-Strahlung, 168
- Szintillator, 180
  
- Translationssymmetrie, 23
  
- Umklapp-Prozesse, 57
  
- van-der-Graaf-Beschleuniger, 165
- van-Hove Singularitäten, 49
- verzögerte Neutronen, 187
- Vieldrahtkammer, 180
- Vierfaktor-Formel, 187
  
- W-Bosonen, 200
- Wärmetönung, 184
- Wiedemann-Franz-Gesetz, 59
- Wigner-Seitz-Zelle, 24
- Woods-Saxon-Potential, 140
  
- Zeeman-Aufspaltung, 127
- Zerfallskonstante, 147
- Zustandsdichte, 18
- Zustandssumme, 10