

# Formelsammlung Werkstoffkunde

Diese Formelsammlung wurde von Jan Peters ([www.jan-peters.net](http://www.jan-peters.net)) erstellt und hat vielen Studenten durch ihr Vordiplom geholfen. Den Autoren wuerde ein Link zu seiner Downloadseite <http://www.jan-peters.net/Miscellaneous/LectureNotes> sehr freuen!

















# Aufbau der Materie

**Diskretes Energiespektrum:**  $E_n = hf \left( n + \frac{1}{2} \right) = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right) = M\omega^2 \frac{x_0^2}{2}$

**Energie – Emission:**  $n \rightarrow n - 1$ , **Absorption:**  $n \rightarrow n + 1$

**Photonenmasse:**  $m_{ph} = \frac{\hbar\omega}{c^2}$  (aus  $E = \hbar\omega = m_{ph} c^2$ )

**Photonenimpuls:**  $p_{ph} = m_{ph} c = \frac{\hbar\omega}{c} = \frac{\hbar}{\lambda} = \hbar \vec{k}$

**Absorption:**  $E_{photon} = \hbar\omega \rightarrow E_{photon} = 0$ ,  $\vec{p}_{photon} = \hbar \vec{k} \rightarrow \vec{p}_{photon} = 0$   
 $E_{Atom} = E_0 \rightarrow E_{Atom} = E_0 + \hbar\omega$ ,  
 $\vec{p}_{Atom} = \vec{p} \rightarrow \vec{p}_{Atom} = \vec{p} + \hbar \vec{k}$

**Emission:**  $E_{Atom} = E_{Atom} - \hbar\omega$ ,  $\vec{p}_{Atom} = \vec{p}_{Atom} - \hbar \vec{k}$

**Materiewellen (de Broglie):**  $\Psi(\vec{r}, t) = C \cdot e^{j(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r})}$

**Ebene Materialwelle:**  $\Psi(\mathbf{x}, t) = C \cdot e^{j(\omega t - kx)}$

**Dispersionsbeziehung:**  $\omega(\mathbf{k}) = \frac{\hbar}{2m} k^2$ , **Phasengeschw.:**  $v_{ph} = f\lambda = \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar k}{2m} = \frac{1}{2} v = \frac{1}{2} c$

**Gruppengeschwindigkeit:**  $v_{gr} = \frac{d\omega}{dk} = v = c$

**Heisenbergs Unschärferelation:**  $\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$  und  $\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$

**Schrödingergleichung:**  $-j\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar}{2m} \text{div grad } \Psi(\vec{r}, t)$

**Allg. Schrödingergleichung:**  $-j\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar}{2m} \Delta \Psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r}, t) \cdot \Psi(\vec{r}, t)$

**Bei  $V(\vec{r}, t) = V(\vec{r}) \Rightarrow \Psi(\vec{r}, t) = \Psi(\vec{r}) \cdot \phi(t) \Rightarrow$**   
 $-j\hbar \frac{\dot{\phi}(t)}{\phi(t)} = \left[ -\frac{\hbar}{2m} \Delta \Psi(\vec{r}) + V(\vec{r}) \cdot \Psi(\vec{r}) \right] \cdot \frac{1}{\Psi(\vec{r})} = \varepsilon \Rightarrow \phi(t) = e^{j\frac{\varepsilon}{\hbar} t} = e^{j\omega t}$  bei  $\varepsilon = E$

**Zeitunabh. S.Gl.:**  $-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\vec{r}) + V(\vec{r}) \cdot \Psi(\vec{r}) = E \cdot \Psi(\vec{r})$

**Aufenthaltswahrscheinlichkeit:**  $dW(\vec{r}) = \Psi^*(\vec{r}, t) \Psi(\vec{r}, t) dx dy dz$

**Mittlere Ladungsdichte eines Elektrons:**  $\rho(\vec{r}) = -e \Psi^* \Psi$

**Gebundenes Elektron im Potentialtopf:** SGI:  $-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(x) + V(x) \cdot \Psi(x) = E \cdot \Psi(x)$

$U_I = U_{III} \rightarrow \infty \Rightarrow \Psi_I = \Psi_{III} = 0$ ,  $U_{II} = 0 \Rightarrow \Psi_{II} = A e^{jkx} + B e^{-jkx}$  mit  $k^2 = \frac{2m_0}{\hbar^2} E$

**Diskrete Energiewerte:**  $E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_0 a^2} n^2$  **Eigenwertfkt.:**  $\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \cdot \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right)$

# Ladungstransport in Festkörpern

## Elektronen im periodischen Gitterpotential

$V(x + a_0) = V(x)$ , Gitterkonstante  $a_0 = a + b$ ,

Potentialtöpfe  $V = 0$  Breite  $a$  und Barrieren  $V = V_0$  Breite  $b$ .

$$\text{Schödingergl. : I : } \frac{d^2 \Psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \Psi = 0 \quad \text{II : } \frac{d^2 \Psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0) \Psi = 0$$

Lösungen : I :  $\Psi(x) = Ae^{i\alpha x} + Be^{-i\alpha x}$  bei  $0 \leq x \leq a$

II :  $\Psi(x) = Ce^{i\beta x} + Be^{-i\beta x}$  bei  $-b \leq x \leq 0$

$\Psi(x) = e^{-ik a_0} (Ce^{i\beta(x-a_0)} + De^{-i\beta(x-a_0)})$  bei  $a \leq x \leq a + b$

A, B, C, D aus der Stetigkeit von  $\Psi(x)$  und  $\frac{d\Psi(x)}{dx}$  bei  $x = 0$  und  $x = a$ .

$$\alpha = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E}, \quad \beta = \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E)$$

Barrierenstärke  $P = \frac{ma}{\hbar^2} V_0 b$ ,  $P = 3\pi/2$  groß und  $P = \pi/10$  klein.

$P \rightarrow 0$  : Barriere verschwindet, es gilt  $E = \frac{(\hbar k)^2}{2m}$  (freie Elektronen)

$P \rightarrow \infty$  : Unendlich hohe Barrieren, diskrete Energieniveaus,  $\alpha = \frac{n\pi}{a}$

## Elektrische Bandstruktur

$$\text{Effektive Masse freier Elektronen : } m^* = \frac{\hbar^2}{\frac{d^2 E(k)}{dk^2}}$$

$$E(k) = \frac{(\hbar k)^2}{2m}, \quad \text{Teilchengeschwindigkeit } v_{gr} = \frac{d\omega}{dk} = \frac{1}{\hbar} \frac{dE(k)}{dk} = \frac{\hbar}{m} k$$

## Elektrische Eigenschaften von Materie

$$\text{Elektrische Leitfähigkeit der Metalle : } \sigma = - \frac{en\Delta p_x}{m^* E_x} = \frac{e^2 \tau}{m^*} n$$

Reibung / Streuung an Gitterschw. ( $\sim 1/\tau_{ph}$ ) und an Fremdatomen ( $\sim 1/\tau_i$ )

Gesamtreibung  $1/\tau = 1/\tau_{ph} + 1/\tau_i$

Mathiessche Regel / Spez. Widerstände :  $\rho = \rho_{ph} + \rho_i$

Temperaturabh. :  $\rho = \rho_0 (1 + \alpha T)$ , Tiefe Temperaturen  $\rho \sim T^5 + \rho_i$

Leiterwerkstoffe ( $\sigma$  - Werte) auf S.96, Widerstandswerkstoffe (S.97 - 98)

Kontaktwerkstoffe : Austrittsarbeit  $\Phi_i$ , Kontaktpotential  $E_c = \Phi_1 - \Phi_2$ ,

$$\text{Kontaktspannung } U_{12} = \frac{E_c}{e}$$

Elektrochemische Spannung,



# Halbleiter

## Ladungsträger in intrinsischen Halbleitern

$$\text{Lochwahrscheinlichkeit } f_n(E, T) = 1 - f(E, T) = 1 - \frac{1}{1 + e^{\frac{E-E_F}{kT}}}$$

$$\text{Elektronendichten } \frac{dn}{dE} = D_L(E) f(E, T), \quad \text{Lochdichte } \frac{dp}{dE} = D_L(E) [1 - f(E, T)]$$

$$n = \int_{E_L}^{\infty} D_L(E) f(E, T) dE, \quad p = \int_{-\infty}^{E_V} D_V(E) [1 - f(E, T)] dE$$

$$D_L(E) = M_L \frac{(2 m_n^*)^{3/2}}{2 \pi^2 \hbar^3} \sqrt{E_V - E} \quad \text{und} \quad D_V(E) = \frac{(2 m_p^*)^{3/2}}{2 \pi^2 \hbar^3} \sqrt{E - E_V}$$

In  $E_V < E < E_L$  gilt  $D(E) = 0$ .

Im Leitungsband mit  $\frac{E - E_F}{kT} \gg 1$  gilt :

$$n = \frac{2 M_L \left( \frac{2 m_n^* kT}{2 \pi \hbar^2} \right)^{3/2}}{N_L^*} e^{-\frac{E_L - E_F}{kT}} \quad \text{und} \quad p = \frac{2 \left( \frac{2 m_p^* kT}{2 \pi \hbar^2} \right)^{3/2}}{N_V^*} e^{-\frac{E_F - E_V}{kT}}$$

(Zahlenwerte S. 107)

$$\text{D. therm. Anregung entstandene } n_i = p_i \Rightarrow E_F = \frac{E_V + E_L}{2} + \frac{kT}{2} \ln \frac{N_V^*}{N_L^*}$$

**Dotierte Halbleiter**

Ladungsträgerkonzentration in dotierten Halbleitern

$$\frac{dn}{dt} = \frac{dp}{dt} = A(T) - B(T) \cdot n \cdot p$$

$$\text{Gleichgewicht } \frac{dn}{dt} = \frac{dp}{dt} = 0 \Rightarrow np = \frac{A(T)}{B(T)} = N_L^* N_V^* e^{-\frac{E_g}{kT}}$$

Dichte der Donatoren  $N_D = N_D^0 + N_D^+$ , der Akzeptoren:  $N_A = N_A^0 + N_A^-$ 

$$N_D^0 = N_D \cdot f(E_F, T) = N_D \frac{1}{1 + e^{\frac{E_D - E_F}{kT}}}, \quad N_A^- = N_A \cdot f(E_A, T) = N_A \frac{1}{1 + e^{\frac{E_A - E_F}{kT}}}$$

$$\text{Ladungsneutralität } n + N_A^- = p + N_D^+ \Rightarrow n = \frac{N_D}{1 + e^{\frac{E_L - E_D}{kT}} \cdot \frac{n}{N_L^*}}$$

$$kT \ll E_L - E_D \Rightarrow n = \sqrt{N_D N_L^*} e^{\frac{E_L - E_D}{kT}}$$

Ladungstransporteigenschaften  $\vec{j} = -ne \cdot \vec{v}_n + pe \cdot \vec{v}_p$ 

$$\text{Ladungsträgerbeweglichkeit } \mu: \vec{v} = \pm \mu \vec{E}, \quad \mu = \frac{e\tau}{m^*}$$

$$\tau_i \sim \frac{T^{3/2}}{N_i}, \quad \tau_{ph} \sim \frac{1}{T^{3/2}}, \quad \frac{1}{\tau_{ges}} = \frac{1}{\tau_i} + \frac{1}{\tau_{ph}}$$

**Ausgleichsvorgänge****Ladungsträger – Lebensdauer**

$$\frac{dn}{dt} = -\frac{n - n_0}{\tau_n} = \frac{dp}{dt} = -\frac{p - p_0}{\tau_p}, \quad n - n_0 = p - p_0, \quad \tau_n = \tau_p \quad (\text{Zahlen S.120})$$

$$n - \text{Dotierte HL. : } n \approx N_D, \quad p \approx \frac{n_i^2}{N_D} \ll n$$

$$p - \text{Dotierte HL. : } p \approx N_A, \quad n \approx \frac{n_i^2}{N_A} \ll p$$

**Ausgleich der Minoritätsträgerdichte**

$$\text{Gesamtgenerationsrate } G = \underbrace{G_T}_{\text{Therm.}} + \underbrace{G_L}_{\text{Opt.}}, \quad G_T = r(T) \cdot n_i^2,$$

$$\text{Beleuchtet } G_L = \frac{dn}{dt} + r(T) \cdot (np - n_i^2) = \frac{dp}{dt} + r(T) \cdot (np - n_i^2)$$

$$\text{Abschalten bei } t = 0 : G_L = \frac{dp}{dt} + R = n_i^2 r(T) - N_D p \cdot r(T) + R = -(p - p_0) N_D r(T)$$

$$\text{Rekombinationsrate } R = r(T) \cdot np$$

$$\text{Abklingen der übersch. Minoritätsladung : } \tau_p = \frac{1}{r(T) N_D} \quad (\text{analog f. } \tau_n, N_A)$$

**Ausgleich der Majoritätsträgerdichte :**

$$\text{div}(\vec{j} + \vec{D}) = 0, \quad \vec{j} = \frac{\sigma}{\varepsilon} \vec{D}, \quad \rho = \text{div} \vec{D} \Rightarrow \dot{\rho} + \frac{\sigma}{\varepsilon} \rho \Rightarrow \tau_R = \frac{\sigma}{\varepsilon}$$

**Ausdehnung der Störungen**

$$j_n^{\text{diff}} = eD_n \frac{dn}{dx}, \quad j_p^{\text{diff}} = -eD_p \frac{dp}{dx}, \quad D_n = \frac{kT}{e} \mu_n, \quad D_p = \frac{kT}{e} \mu_p$$

$$\text{Kontinuitätsgleichung : } \frac{dp}{dt} = D_p \frac{d^2 p}{dx^2} - \frac{p - p_0}{\tau_p}$$

$$\text{Stationärer Fall} \left( \frac{dp}{dt} = 0 \right) : p(x) = [p(0) - p_0] e^{-\frac{x}{L_p}} + p_0, \quad p_0 = \frac{n_i^2}{N_D}$$

$$\text{Diffusionslängen } L_p = \sqrt{D_p \tau_p}, \quad L_n = \sqrt{D_n \tau_n},$$

$$L_{n,p} = \sqrt{D_{n,p} \tau_{n,p}} = \sqrt{\frac{kT}{e} \mu_{n,p} \tau_{n,p}} = \sqrt{v_x^2 \tau_{n,p}}$$

$$L_D = \sqrt{D_{\tau_R}} = \sqrt{\frac{kT}{e} \mu \frac{\sigma}{\varepsilon}} = \sqrt{\frac{kT}{e^2} \frac{\varepsilon}{N_D}} \quad \text{mit } \sigma = n \cdot e\mu, \quad n = N_D$$





**Dielektrische Eigenschaften von Festkörpern**

Verallg. Permittivität  $\vec{D} = \epsilon \vec{E} = \epsilon_0 \epsilon_r \vec{E}$ ,  $\epsilon_0 = 8,85 \cdot 10^{-12} \frac{\text{As}}{\text{Vm}}$

$$\vec{D} = \epsilon_0 \vec{E} + \vec{P} = \epsilon_0 (1 + \chi) \vec{E}, \underline{\epsilon}_r = \epsilon' - j\epsilon'', \tan \delta = \frac{\epsilon''}{\epsilon'}, \underline{\epsilon}_r = |\underline{\epsilon}_r| e^{-j\delta}$$

Dipolmoment:  $\vec{p} = \epsilon_0 \alpha \vec{E}_a$ ,  $\vec{P} = \epsilon_0 N \alpha \vec{E}_a$ ,  $\chi = \frac{\vec{P}}{\epsilon_0 \vec{E}} = \frac{\alpha N}{1 - \frac{\alpha N}{3}}$

Claudius – Mosotti – Gleichung:  $\frac{\alpha N}{3} = \frac{\epsilon_r - 1}{\epsilon_r + 1}$

**Elektr. Polarisation im mikroskopischen Bild**

Elektr. Pol.: Dipol:  $\vec{p} = 4 \pi \epsilon_0 R^3 \vec{E} = \epsilon_0 \alpha \vec{E}$ , Pol.:  $\alpha = 4 \pi R^3$

Ion.Pol.(: u)<sub>1</sub> - u<sub>2</sub> =  $\frac{q}{2c} |\vec{E}|$ ,  $\vec{p} = \frac{q^2}{2c} \vec{E} = \epsilon_0 \alpha \vec{E}$ ,  $\alpha = \frac{q^2}{2c \epsilon_0}$

Orientierungspol.:  $U = -\vec{p} \cdot \vec{E} = -p |\vec{E}| \cos \theta$ ,  $\alpha = \frac{p \langle \cos \theta \rangle}{\epsilon_0 |\vec{E}|} = \frac{p^2}{3 k T \epsilon_0}$

**Frequenzabh. der Polarisation****Ionische bzw. elektrische Polarisation**

$$P(\omega) = P(\omega = 0) \frac{1}{1 + j\omega\tau}, \tau \text{ Thermodyn. Zeitkonstante}$$

$$\chi(\omega) = \chi'(\omega) - j\chi''(\omega) = \chi(0) \left( \frac{1}{1 + \omega^2 \tau^2} - j \frac{\omega\tau}{1 + \omega^2 \tau^2} \right)$$

$$\epsilon'(\omega) = 1 + \chi_{\text{Dipol}}(\omega) + \chi_{\text{Ion}}(0) + \chi_{\text{El}}(0), \epsilon''(\omega) = \chi''_{\text{Dipol}}(\omega)$$

$$\epsilon'(\omega) = \epsilon_\infty + \frac{\epsilon_{\text{stat}} - \epsilon_\infty}{1 + \omega^2 \tau^2} \wedge \epsilon''(\omega) = \frac{\epsilon_{\text{stat}} - \epsilon_\infty}{1 + \omega^2 \tau^2} \omega\tau, \epsilon_{\text{stat}} = \epsilon'(0)$$

Ferroelektr., Curie – Weiss – Gesetz:  $\chi = \frac{C}{T - \Theta}$ ,  $\Theta \approx T_C$

Piezoelekt.:  $\vec{D} = \epsilon_0 \epsilon_r \vec{E} + \underline{e}_p \underline{\epsilon}$ ,  $\underline{\sigma} = \underline{c} \underline{\epsilon} + \underline{e}_p \vec{E}$

Eindimensionaler Fall:  $D = \epsilon_0 \epsilon_r E_x - k_p \frac{\Delta l}{l}$ ,  $\sigma_{xx} = c \frac{\Delta l}{l} + k_p E_x$

Elektrostriktion  $\frac{\Delta l}{l} = k_p |\vec{E}|$ , Pyroelektr.  $\Delta P = \lambda \Delta T$ ,  $\lambda \approx 10^{-8} \text{ As/cm}^2 \text{ K}$

**Optische Eigenschaften**

Phasengeschw.(: v)<sub>ph</sub> =  $\frac{1}{\sqrt{\epsilon\mu}} = \frac{1}{\sqrt{\epsilon_0 \mu_0}} \frac{1}{\sqrt{\epsilon_r}}$ , Brechzahl  $n = \frac{c}{v_{\text{ph}}} = \sqrt{\epsilon_r}$

$$n = n' - jn'' \Rightarrow \epsilon' = n'^2 - n''^2, \epsilon'' = 2n'n''$$