Zusammenfassung vom 11.02.2011

Abschätzung des Abfalls von $v(\vec{r})$

- **aus Neutralität des Kristalls plus Periodizität folgt Neutralität der WSZ** ➔ $Q = 0$

  WSZ = *Wigner-Seitz-Zelle*

- **aus Inversionssymmetrie des Kristalls folgt Inversionssymmetrie der WSZ:** $\vec{p} \xrightarrow[\text{Inversion}]{} -\vec{p}$ ➔ $\vec{p} = -\vec{p} = 0$

- **aus kubischer Symmetrie des Kristalls folgt kubische Symmetrie der WSZ** ➔ **invariant unter 90°-Drehung** ➔ $\text{Quadrupolterm} = 0$

- **aus Inversionssymmetrie der WSZ** ➔ $\text{Oktopolterm} = 0$

- **$v(\vec{r})$ fällt mindestens ab wie $1/r^5$:** $v(|\vec{r}|) = \mathcal{O}\left(\frac{1}{r^5}\right), \quad r > \phi(\text{WSZ})$

- **U^{inf} (r) wird sehr gut approximiert durch die Beiträge der WSZ innerhalb weniger Gitterkonstanten**

Potential des endlich großen Kristalls *(ohne Randeffekte)*

$$U^{fin}(\vec{r}) = \sum_{\vec{T}\text{ in V}} v\left(\vec{r} - \vec{T}\right)$$

$\vec{T}$ = ***Translationsvektor***

V = ***Kristallvolumen***

mit $$v(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \int_{\text{WSZ}} d^3r' \, \rho(\vec{r}\,') \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}\,'|}$$

periodisches Potential in der WSZ

Zusammenfassung vom 11.02.2011

Abschätzung der Austrittsarbeit

➔ **wegen $1/r^5$-Abfall des Potentials der WSZ gilt im *Innern* des Kristalls:** $U^{fin}(\vec{r}) \cong U^{inf}(\vec{r})$

➔ **und *außerhalb* des Kristalls:** $U^{fin}(\vec{r}) \cong 0$

➔ ***höchster* besetzter Zustand im Innern des Kristalls ist immer noch gegeben durch E_F:** $E_{innen}^{max} = E_F$

➔ ***tiefste* Energie außerhalb des Kristalls:** $E_{außen}^{min} = \underbrace{U^{fin}}_{=0} + \underbrace{E_{kin}}_{\geq 0} = 0$

➔ $W = E_{außen}^{min} - E_{innen}^{max} = 0 - E_F = -E_F$

Berücksichtigung von Oberflächen-effekten

➔ **Ladungsdichteverteilung ist in den WSZ an der Oberfläche eines endlichen Kristalls aufgrund von Relaxation und Rekonstruktion *verschieden* von derjenigen im Innern**

Oberflächen-dipolmoment und -ladungsdichte

➔ **führt zu einem *nicht verschwindenden* Dipolmoment und/oder zu einer Oberflächenladungsdichte**

➔ **es existiert innerhalb der gestörten, oberflächennahen WSZ ein *elektrisches Feld* $\vec{E}_s$, gegen das die Elektronen arbeiten müssen, wenn sie den Kristall verlassen wollen**

Oberflächen-Energiebeitrag

➔ $W_s = -e\int \vec{E}_s \cdot d\vec{s}$

Austrittsarbeit

➔ $W = -E_F + W_s$ $\qquad$ ***W_s = Oberflächen-Energiebeitrag***

Zusammenfassung vom 11.02.2011

Oberflächen-potential

➔ **Oberflächen mit *verschiedener* Kristall-Richtung müssen im gleichen Kristall aufgrund unterschiedlicher Relaxation oder Rekonstruktion *nicht* das gleiche Potential haben**

➔ **für geschlossenen Weg über zwei verschiedene Oberflächen *F* und *F‘* gilt dann:** $\Delta W = 0 = \oint \vec{E} \cdot d\vec{s} = W_s - e\left(\phi' - \phi\right) - W_s'$

➔ $-e\left(\phi' - \phi\right) = W_s' - W_s \neq 0$ **ϕ, ϕ‘ = *Oberflächenpotential für* F, F‘**

W_s, W_s‘ = *Oberflächenenergie für* F, F‘

Kontakt-Potential

Potentialdifferenz zwischen den Oberflächen von zwei Metallen, wenn zwei Metalle so verbunden werden, dass von einem Metall zum anderen Ladungen fließen können

➔ **die chemischen Potentiale der beiden Metalle müssen sich angleichen:** $\mu_1 = \mu_2$ ➔ $E_{F,1} = E_{F,2}$

➔ $\Delta\phi_{\text{kontakt}} - e\left(\phi_2 - \phi_1\right) = W_2 - W_1$ **ϕ_1, ϕ_2 = *Oberflächenpotential der Metalle***

W_2, W_1 = *Austrittsarbeit der Metalle*

Zusammenfassung vom 11.02.2011

Kelvin-Sonden Mikroskopie

Messmethode zur Bestimmung des Kontakt-Potentials $\Delta\phi_{Kontakt}$

- ➔ **durch das Verbinden der Metalle ist das Kontakt-Potential $\Delta\phi_{Kontakt}$ festgelegt, unabhängig vom gegenseitigen Abstand der beiden Metalle**
- ➔ **stehen sich die Metalle als Flächen gegenüber, so definieren sie einen Plattenkondensator, dessen Spannung durch das Kontakt-Potential $\Delta\phi_{Kontakt}$ definiert und deshalb unabhängig vom gegenseitigen Abstand ist**
- ➔ **wird der Abstand variiert, so ändert sich die Kapazität und es müssen Ausgleichsströme fließen, um die Spannung konstant zu halten (da $C_{Kontakt} = Q/ \Delta\phi_{Kontakt}$)**
- ➔ **durch Anlegen einer Gegenspannung $U_{gegen} = \Delta\phi_{Kontakt}$ fließt kein Strom mehr ➔ Messung von $\Delta\phi_{Kontakt}$**

Glühemission

Messmethode zur Bestimmung der Austrittsarbeit *W*

- ➔ **Emission von Elektronen, wenn eine Metallglühwendel genügend erhitzt wird**
- ➔ **ausgetretene Elektronen werden als verdünntes freies Elektronengas behandelt**

emittierter Elektronenstrom

$$j_{emission} = -\frac{e\,m}{2\pi^2\hbar^3}(kT)^2 e^{-\frac{W}{kT}}$$

➔ **Messung von W**