Vorlesung Theoretische Festkörperphysik

Allg. Einführung

Sprechstunde

VL: Di 10 – 12 EW 203 meistens: Marten Richter EW 710 Mo 11:30 – 12:30
mrichter@itp.tu-berlin.de

Mi 10 – 12 EW 203 meistens: Ermin Malic EW 703 Mi 11:45 – 12:45
ermin.malic@tu-berlin.de

Übungen

Mi 14 – 16 EW 229 Julia Kabuß EW 703 Do 10 – 11
julia@itp.tu-berlin.de

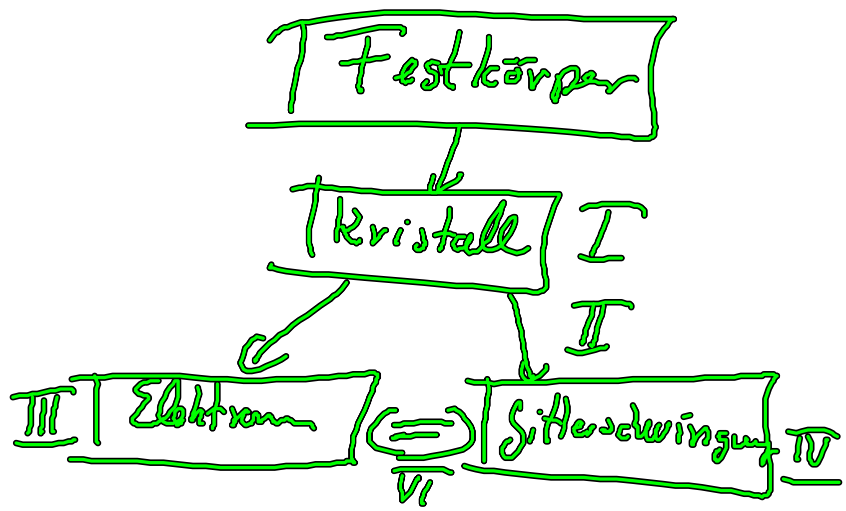
Übungsaufgaben
Ausgabe Di Abgabe: Mi am Beginn (!) der VL

Schein 60% der Punkte, keine Klausur

Zusammen mit VL von Prof. Scherz am Mo 12 – 14 EW 203 Wahlpflichtfach

Gliederung der Vorlesung

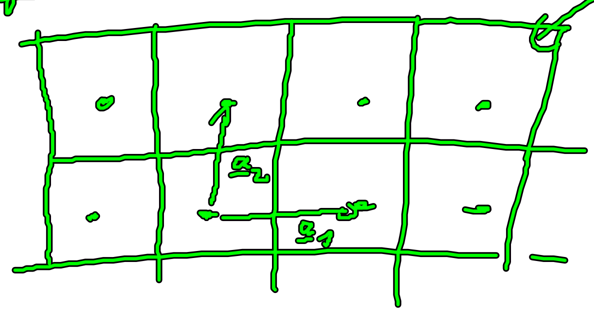
I Kristallsymmetrie (MR)
II Born – Oppenheimer (EM)
III Elektronische Zustände (MR)
IV Gitterschwingungen (EM)
V 2. Quantisierung (MR)
VI Elektron – Phonon Wechselwirkung (EM)
VII Elektron – Elektron Wechselwirkung (MR)
VIII Elektronischer Transport (EM)
XI Supraleitung und Polaritonen (MR)
X Optik (EM)



I. Kristallsymmetrie

Atome im Kristall besitzen im Gegensatz zu amorphen Festkörpern regelmäßige Atompositionen. (Invarianz gegenüber Symmetrieoperationen des diskreten Gitters)

Bsp.:



Die kleinste Einheit ist die Einheitszelle

$\underline{a}_i$ Einheitsvektor

Die erlaubten Translationen werden beschrieben durch die primitive Translation

$$\underline{R}_n = n_1 \underline{a}_1 + n_2 \underline{a}_2 + n_3 \underline{a}_3 \quad \text{mit } n_1, n_2, n_3 \text{ ganze Zahlen!}$$

Das beschreibt auch Gitter des Kristalls

Im Allgemeinen sind $\underline{a}_1, \underline{a}_2, \underline{a}_3$ nicht orthogonal zueinander und nicht normiert.

Möglich sind auch Drehungen und Spiegelungen $\Rightarrow$ Punkttransformationen S.

Diese haben Gruppeneigenschaften

1) $S_1 S_2$ wieder ein Element der Gruppe
2) $S_1 (S_2 S_3) = (S_1 S_2) S_3$
3) $S\,E = S$
4) Es existiert für jedes S ein S^{-1}, so dass $S S^{-1} = \underline{E}$

Punkttransformation linearen Abbildung

$\underline{r}' = S \underline{r}$; hier ist S durch 3×3 Matrix darstellbar.

S orthogonal, das Skalarprodukt wird invariant gelassen

$$(S\underline{r}, S\underline{r}) = (\underline{r}, \underbrace{S^T S}_{E} \underline{r}) = (\underline{r}, \underline{r})$$

$\Rightarrow \det S = 1$ (Drehung)

$\det S = -1$ (Drehung + Inversion)

$S = -E$ Inversion

Welche Drehungen können die Translationsinvarianz erhalten?

Man kann zeigen, dass nur die Wahl

$\varphi \in \{0, \frac{\pi}{3}, \frac{\pi}{2}, \frac{2\pi}{3}, \pi\}$ möglich sind (ÜA)

<u>also</u> $E, D_2, D_3, D_4, D_6, -E$ können alle Punktgruppen bei Kombination über Drehungen aller Achsen beschreiben.

D_2: zweizählige Symmetrie

<u>Bemerkung</u>: Aus den Punktgruppen können oft allgemeine Aussagen über physikalische Eigenschaften gemacht werden.

Die Klassifikation der Gitter erfolgt über die verschiedenen Typen der <u>Bravais</u> Gitter über.

Allgemein für eine auf den Gitterpunkten definierte Fkt.

$$f(S\underline{r} + \underline{R}) = f(\underline{r})$$ für die Translations- und Symmetrieoperation des jeweiligen Gitters!

<u>Reziproke Gitter</u>

Eine Gitter periodische Fkt $f(\underline{r}) = f(\underline{r} + \underline{R})$

Fourier-Reihe

$$f(\underline{r}) = \sum_{\underline{g}} F(\underline{g})\, e^{i\underline{g}\cdot\underline{r}}$$

Welche reziproke <u>Gittervektoren</u> sind hier erlaubt?

$$\sum_{\underline{g}} F(\underline{g})\, e^{i\underline{g}\cdot\underline{r}} = f(\underline{r}) = f(\underline{r}+\underline{R}) = \sum_{\underline{g}} F(\underline{g})\, e^{i\underline{g}\cdot\underline{r} + i\underbrace{\underline{g}\cdot\underline{R}}_{= 2\pi n}}$$

$$\Rightarrow \quad \underline{g}\cdot\underline{R} = 2\pi n \qquad n \in \mathbb{Z}$$

mit $\underline{R} = n_1 \underline{a}_1 + n_2 \underline{a}_2 + n_3 \underline{a}_3 \quad n_i \in \mathbb{Z}$

$\underline{g} = m_1 \underline{g}_1 + m_2 \underline{g}_2 + m_3 \underline{g}_3 \quad m_i \in \mathbb{Z}$

$$(n_1 \underline{a}_1 + n_2 \underline{a}_2 + n_3 \underline{a}_3) \cdot (m_1 \underline{g}_1 + m_2 \underline{g}_2 + m_3 \underline{g}_3) = 2\pi m$$

Ich wähle jetzt $\underline{a}_i \cdot \underline{g}_j = 2\pi \delta_{ij}$!

$\underline{g}_i$ spannen das reziproke Gitter auf.

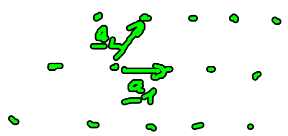
Also $\underline{g}_i$ steht senkrecht auf Vektoren $\underline{a}_j$ und $\underline{a}_k$ mit i,j,k zyklisch!

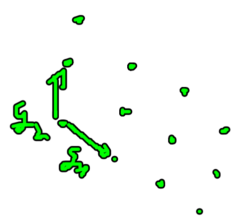
$$\underline{g}_i = c \; \underline{a}_j \times \underline{a}_k$$

$$\underline{a}_i \cdot \underline{g}_i = c \; \underline{a}_i \cdot (\underline{a}_j \times \underline{a}_k) = 2\pi$$

$$\Rightarrow \quad \underline{g}_i = 2\pi \frac{\underline{a}_j \times \underline{a}_k}{\underline{a}_i \cdot (\underline{a}_j \times \underline{a}_k)} \; , \quad \underline{a}_i = 2\pi \frac{\underline{g}_j \times \underline{g}_k}{\underline{g}_i \cdot (\underline{g}_j \times \underline{g}_k)}$$

Beispiel: 2D Gitter





$\underline{a}_1 \perp \underline{g}_2$

$\underline{a}_2 \perp \underline{g}_1$

Zurück zur Fourier Reihe

$$f(\underline{r}) = \sum_{\underline{g}} F(\underline{g}) \underbrace{e^{i \underline{g} \cdot \underline{r}}} \longleftarrow \text{Bilden ONS auf der Elementarzelle}$$

$$\frac{1}{\Omega} \int_\Omega d\underline{r} \; e^{i(\underline{g}' - \underline{g}) \cdot \underline{r}} = \delta_{\underline{g},\underline{g}'}$$

Weiterhin sei das Gitter periodisch

$$e^{i\underline{g}\cdot(\underline{r}+\underline{R})} = e^{i\underline{g}\cdot\underline{r} + i\underbrace{\underline{g}\cdot\underline{R}}_{2\pi n}} = e^{i\underline{g}\cdot\underline{r}}$$

$$\boxed{F(\underline{g}) \overset{!}{=} \frac{1}{\Omega}\int_\Omega f(\underline{r})\, e^{-i\underline{g}\cdot\underline{r}}\, d^3r} = \frac{1}{\Omega}\int_\Omega \sum_{g'} F(\underline{g}')\, e^{i\underline{g}'\cdot\underline{r} - i\underline{g}\cdot\underline{r}}\, d^3\underline{r}$$

$$= \sum_{g'} F(\underline{g}')\, \underbrace{\frac{1}{\Omega}\int e^{i(\underline{g}'-\underline{g})\cdot\underline{r}}\, d^3\underline{r}}_{\delta_{\underline{g}\underline{g}'}} = F(\underline{g})$$

$\Longrightarrow$ Born Oppenheimer Abschnitt $\Longrightarrow$ E4

III. Elektronische Zustände

III.1 Blochsche Theorem

Formulierung der Translation $\underline{R}_n$ mittels des Translationsoperators: T_n

$$T_n f(\underline{r}) = f(\underline{r}+\underline{R}_n)$$

Kann z.B. auf die el. Wellenfunktion ψ angewendet

$$T_n \psi(\underline{r}) = \psi(\underline{r}+\underline{R}_n) = \underset{\text{EV}}{t_n}\, \psi(\underline{r})$$

Phasenfaktor! Warum? Die Wellenfkt ist kein Observable! Die Wahrscheinlichkeiten $|\psi(\underline{r})|^2$ und $|\psi(\underline{r}+\underline{R})|^2$ sind Observablen und müssen dann gitterperiodisch sein!

Der Hamiltonoperator ist auch Translationsinvariant!

$$H = \frac{p^2}{2m} + V_0(\underline{r}) \longleftarrow \text{Gitterperiodisch!}$$

$$[H, T_n] \overset{!}{=} 0$$

__Bew:__ $$(HT_n - T_n H)\,\psi(\underline{r}) = H \underbrace{\psi(\underline{r}+\underline{R}_n)}_{t_n \psi(\underline{r})} - T_n\left(\frac{p^2}{2m} + V_0(\underline{r})\right)\psi(\underline{r})$$

$$= t_n H \psi(r) - \underbrace{\left[\frac{p^2}{2m} + \underbrace{V_0(r+R_n)}_{V_0(r)}\right]}_{H} \underbrace{\psi(r+R_n)}_{t_n \psi(r)} = t_n H\psi(r) - t_n H\psi(r) = 0$$

q.e.d.

$[H, T_n]_- = 0$ folgt der Hamiltonop und Translationsoperator haben ein gemeinsames System von Eigenfkt ?

Also gibt es ein System von Eigenfkt

$$H\psi_{\lambda,k}(r) = E_{\lambda,k}\psi_{\lambda,k}(r)$$

$$T_n \psi_{\lambda,k}(r) = t_{n,k}\psi_{\lambda,k}(r)$$

mit den Quantenzahlen λ und k

Da T_n Normierung nicht ändern sollte $\Rightarrow$ $|t_n| = 1$

außerdem $t_{n,k} t_{m,k} = t_{n+m,k}$ weil $T_{n+m} = T_n T_m$

$\Rightarrow$ $t_{n,k} = e^{i(k\cdot R_n)}$ $\quad t_{n,k} t_{m,k} = e^{i(k\cdot R_n)} e^{i(k\cdot R_m)} = e^{i(k\cdot(R_n+R_m))}$

$$t_{n,k} = e^{i(k\cdot R_n + 2\pi n)} = e^{i(k\cdot R_n + g\cdot R_n)} = e^{i(k+g)\cdot R_n} = t_{n,k+g}$$

Wir können k nur eindeutig auf dem Gebiet der Einheitszelle des reziproken Gitters definieren. Anders kann jedes k an durch Translation durch den reziproken Gittervektor auf die Einheitszelle des reziproken Gitters abgebildet werden.

Daraus folgt

$$\left\| \; e^{ik\cdot R_n}\psi_{\lambda,k}(r) = \psi_{\lambda k}(r+R_n) \; \right\|$$

Bloch Theorem

Folgender Ansatz für die Blochwellenfkt ist üblich:

$$\| \psi_{\lambda,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{\sqrt{V}} \underbrace{u_{\lambda,\mathbf{k}}(\mathbf{r})}_{\text{Blochfunktion}} \|$$ Blochwellenfkt

$V = L^3$ Volumen Festkörpers

$$\psi_{\lambda,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \underbrace{\psi_{\lambda,\mathbf{k}}(\mathbf{r}+\mathbf{R}_n)}_{\frac{e^{i\mathbf{k}(\mathbf{R}_n+\mathbf{r})}}{\sqrt{V}} u_{\lambda,\mathbf{k}}(\mathbf{r}+\mathbf{R})} = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_n} \psi_{\lambda,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$

$$= \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_n} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{\sqrt{V}} u_{\lambda,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$

$$\Rightarrow \quad \| u_{\lambda,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{\lambda,\mathbf{k}}(\mathbf{r}+\mathbf{R}) \|$$