

# Thermische Festkörperphysik

## Allgemeine Einführung

### Vorlesung

Di: 10-12 EW 203

Mi: 10-12 EW 203

} Marten Richter  
mrichter@itp.tu-berlin.de  
Sprechstunde:  
Mo 16-17 Uhr

### Übung

~~Fr 14-16 Uhr EW 226~~ ~~Fr 14-16 Uhr EW 226~~

oder Mo 14-16 Uhr EW 226

} auswählen

Übungszettelausgabe und -abgabe in der Übung  
Diese Vorlesung kann entweder als Vertiefungspfad TPIV  
verwendet werden oder

oder zusammen mit VL von Prof. Storz der  
Quantenmechanik gebunden Atome

Mo 12-14 EW 203

als Wahlpflicht,

alternativ Seminar 14-16: EW 737

Schein

60% Übungsaufgaben Punkte

Gliederung der Vorlesung (vorläufig)

- I. Kristallsymmetrie
- II. Born - Oppenheimer Näherung
- III. Elektronische Zustände
- IV. Gitterschwingungen
- V. Zweite Quantisierung
- VI. Elektron - Phonon Wechselwirkung
- VII. Elektron - Elektron Wechselwirkung
- VIII. Elektrischer Transport
- XI. Optische Anregungen: Exzitonen
- XII. Polaronen
- XIII. Supraleitung
- XIV. 2D Spektroskopie . . . .

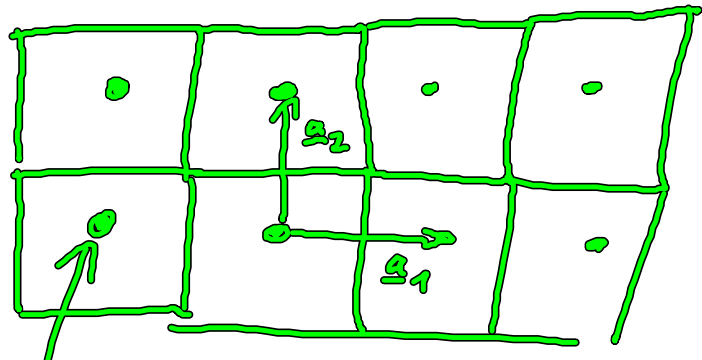
## I. Kristallsymmetrie

Atome in Kristall besitzen in Gegensatz zu amorphen Festkörpern regelmäßige Anordnung.

(Invarianz gegenüber Symmetrietransformationen  
des diskreten Gitters)

Die kleinste Einheit ist die Einheitszelle

Bsp:



durch periodische  
Fortsetzung wird  
ganzer Festkörper  
beschrieben.

$a_i$  sind Einheitsvektoren

Atomposition

Die erlaubte Translationsoperation werden beschrieben  
durch die primären Translationen.

$$\underline{R}_n = n_1 \underline{a}_1 + n_2 \underline{a}_2 + n_3 \underline{a}_3 \text{ mit } n_1, n_2, n_3 \in \mathbb{Z}$$

(Außerhalb wird dadurch das Punktgitter des Kristalls  
beschrieben)

Wichtig in Allgemeinen sind  $\underline{a}_1, \underline{a}_2, \underline{a}_3$  nicht senkrecht  
und nicht normiert!

Weiterhin sind Drehung und Spiegel möglich;  
die Punkttransformationen  $S$ .

Diese haben Gruppeneigenschaften:

- 1)  $S_1 S_2$  wieder ein Element der Gruppe
- 2)  $S_1 (S_2 S_3) = (S_1 S_2) S_3$

$$3) \quad S E = S$$

↑  
11 Element

4) Es existiert für jedes  $S$  ein  $S^{-1}$  mit  $SS^{-1} = E$

Punktransformtionen sind lineare Abbildungen:

$$\underline{x}' = S \underline{x} \quad ; \quad \text{hier } S \text{ durch } 3 \times 3 \text{ Matrix darstellbar}$$

$S$  ist orthogonal  
damit Skalarprodukt  
invariant bleibt.

$$(S\underline{x}, S\underline{x}) = (\underline{x}, S^T S \underline{x}) = (\underline{x}, \underline{x})$$

$$\Rightarrow S^T S = E$$

$$\Rightarrow \det S = 1 \quad \text{Drehung}$$

$$\det S = -1 \quad \text{Drehung + Inversion}$$

$$S = -E \quad \text{Inversion}$$

Welche Drehung können die translationsinvarianten Symmetrie invariant lassen?

Man kann zeigen, dass nur Winkel

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

also: Aus  $E, D_2, D_3, D_4, D_6, -E$  können alle  
zweizählige  
Symmetrie

Punktgruppen zueinander gesetzt werden.

Bemerkung: Aus den Punktgruppen können oft allgemeine Aussagen über physikalische Größen wie z.B. permanente Dipolmomente bei Inversionssymmetrie geschlossen werden.

Die Klassifikation der verschiedenen Symmetrie erfolgt über das Bravais System.

Allgemein gilt für eine auf dem Gitterpunkt definierte Fkt

$$f(x + \underline{R}) = f(x) \quad \text{für die Symmetrieebene und} \\ \text{Translation des jeweiligen Gitters!}$$

## Reziprokes Gitter

Bei einer gitterperiodischen Fkt  $f(x) = f(x + \underline{R})$   
kann diese über die Fourier-Reihe dargestellt werden

$$f(x) = \sum_{\xi} F(\xi) e^{i \xi \cdot x}$$

Welche reziproken Gittervektoren sind erlaubt?

$$\sum_{\xi} F(\xi) e^{i \xi \cdot x} = f(x) = f(x + \underline{R}) = \sum_{\xi} F(\xi) e^{i \xi \cdot (x + \underline{R})}$$

$$\Rightarrow \xi \cdot \underline{R} = 2\pi m, \quad m \in \mathbb{Z}$$

$$\text{mit } \underline{R} = n_1 \underline{a}_1 + n_2 \underline{a}_2 + n_3 \underline{a}_3 \quad n_i \in \mathbb{Z} \\ \text{Ansatz für } \xi = m_1 \underline{g}_1 + m_2 \underline{g}_2 + m_3 \underline{g}_3 \quad m_i \in \mathbb{Z} \quad \left. \begin{array}{l} n_i \in \mathbb{Z} \\ m_i \in \mathbb{Z} \end{array} \right\} \text{ beliebig}$$

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

Man kann z.B.  $\underline{a}_i \cdot \underline{g}_j = 2\pi \delta_{ij}$  wählen!

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

Aber steht der Vektor  $\underline{g}_i$  senkrecht zu den Vektoren  $\underline{a}_j, \underline{a}_k$  ist  
(i, j, k zyklisch)

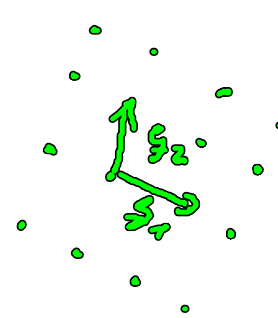
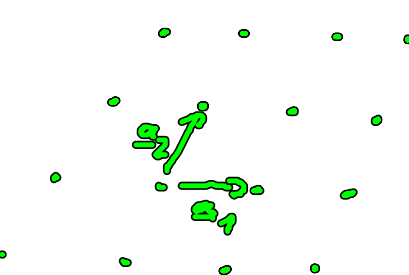
$$\text{Daher } \underline{g}_i = c \underline{a}_j \times \underline{a}_k$$

und aus  $a_i \cdot g_i = c \cdot \underbrace{a_i \cdot (a_j \times a_k)}_{\text{Volumen des Elementarzells}} = 2\pi$

$\Rightarrow g_i = 2\pi \frac{a_j \times a_k}{a_i \cdot (a_j \times a_k)} ; a_i = 2\pi \frac{g_j \times g_k}{g_i \cdot (g_j \times g_k)}$

Beispiel 2D Gitter

reziprokes Gitter



$a_1 \perp g_2$   
 $a_2 \perp g_1$

Zurück zu Fourier Reihe:

$f(x) = \sum_{\xi} F(\xi) e^{i\xi \cdot x}$

ONS auf dem Intervall  $\Omega$

$\frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} dx e^{i(\xi' - \xi) \cdot x} = \delta_{\xi, \xi'}$

Weiterhin sind die Gitterperioden

$e^{i\xi(x+B)} = e^{i\xi x + i\xi B} = e^{i\xi x} e^{2\pi i n} = e^{i\xi x}$

Die Four Reihe ist umkehrbar

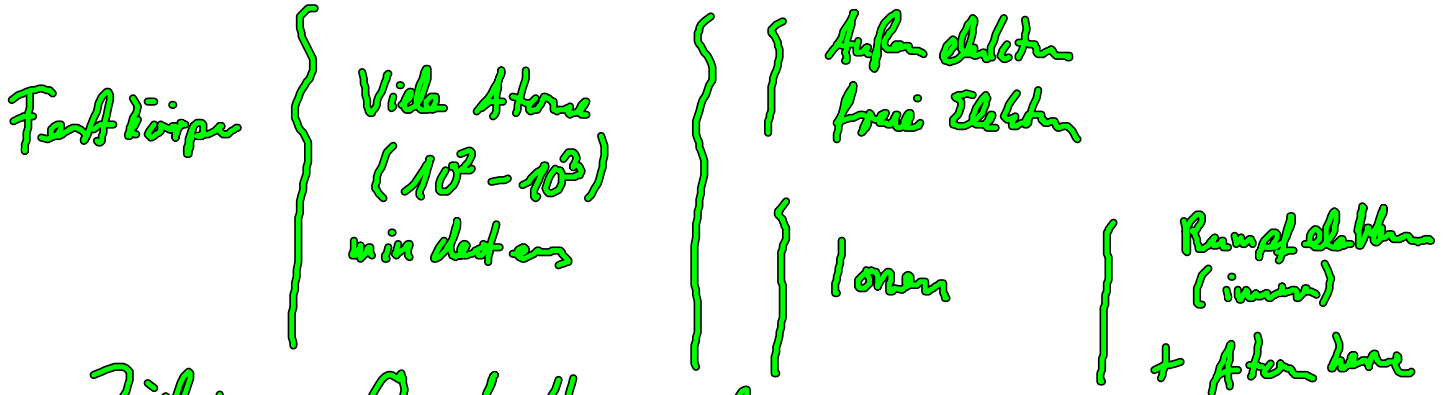
$F(\xi) = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} f(x) e^{-i\xi \cdot x} d^3x$

$= \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} \sum_{\xi'} F(\xi') e^{i\xi' \cdot x - i\xi \cdot x} d^3x$

$$= \sum_{\xi'} F(\xi') \frac{1}{\Omega} \int_{\xi, \xi'} e^{i(\xi' - \xi) \cdot x} dx = F(\xi) \text{ ged.}$$

## II. Born - Oppenheimer Näherung

Welche Probleme sieht es bei der Beschreibung des Festkörpers?



Ziel: Quantentheorie für das gesamte System

Lösung: das komplette Problem des Hamiltonoperators in QM illusorisch.

Dabei: Hamiltonoperator für Valenzelektron + Ionen ansatz  
(ähnliches Vorgehen für Moleküle Chemie)

$$H = \underbrace{H_{el}}_{\text{Elektron allein}} + \underbrace{H_{ion}}_{\text{Ionen allein}} + \underbrace{H_{el-ion}}_{\text{Wechselw. Elektron und Ionen beschreib.}} + \underbrace{H_{ex}}_{\text{Wechselwirkung mit externen Feldern!}}$$

Rein elektronischer Ansatz

$$H_{el} = \underbrace{\sum_i \frac{p_i^2}{2m_e}}_{\text{Hedkin; freie Bewegung}} + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|r_i - r_j|}$$

↑  
 Hier oft Modifikation mit  $\epsilon_r$  (Einfluss von Rumpfionen)

$P_i$ : Impulsoperator des  $i$ -ten Elektrons

$x_i$ : Position des  $i$ -ten Elektrons

Anteil der Ionen

$$H_{\text{ion}} = \sum_i \frac{P_i^2}{2M_i}$$

kinetisch Anteil

$$+ \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V_{\text{ion}}(R_i - R_j)$$

Wechselwirkung der Ionen untereinander  
(in der Regel auch kompliziertes Vielteilchenproblem)

Valenzelektronen und Ionen

Elektron auch mit einander in Wechselwirkung:

$$H_{\text{el-ion}} = \sum_j V_{\text{el-ion}}(x_j - R_j)$$

Potential, das die Wechselwirkung beschreibt.

Insgesamt kompliziertes Problem durch Kopplung der Ionen mit Elektron!

$\Rightarrow$  Ziel: Elektronen und Ionen entkoppeln!

1. Beobachtung: Elektronen und Ionen

haben sehr unterschiedliche Massen!

Ionen schwerer als Elektronen!

$\Rightarrow$  Ionen langsamer!

Ionen können in erster Näherung  
als stark angeregter Zustand

$\Rightarrow$  Lösung des elektronischen Problems

bei starken Ionenpositionen (Gitterschicht-  
problem)

2. Schlussfolgerung



3.) Korrektur

⇒ Born - Oppenheimer Näherung (auch adiabatische Näherung)  
Entwicklung der Ionenspektren  
im Rotor ⇒ Gitterstruktur, Phonon  
und Elektron-Phonon Kopplung  
(siehe IV Gitterstruktur und  
VI Elektron-Phonon Kopplung)